

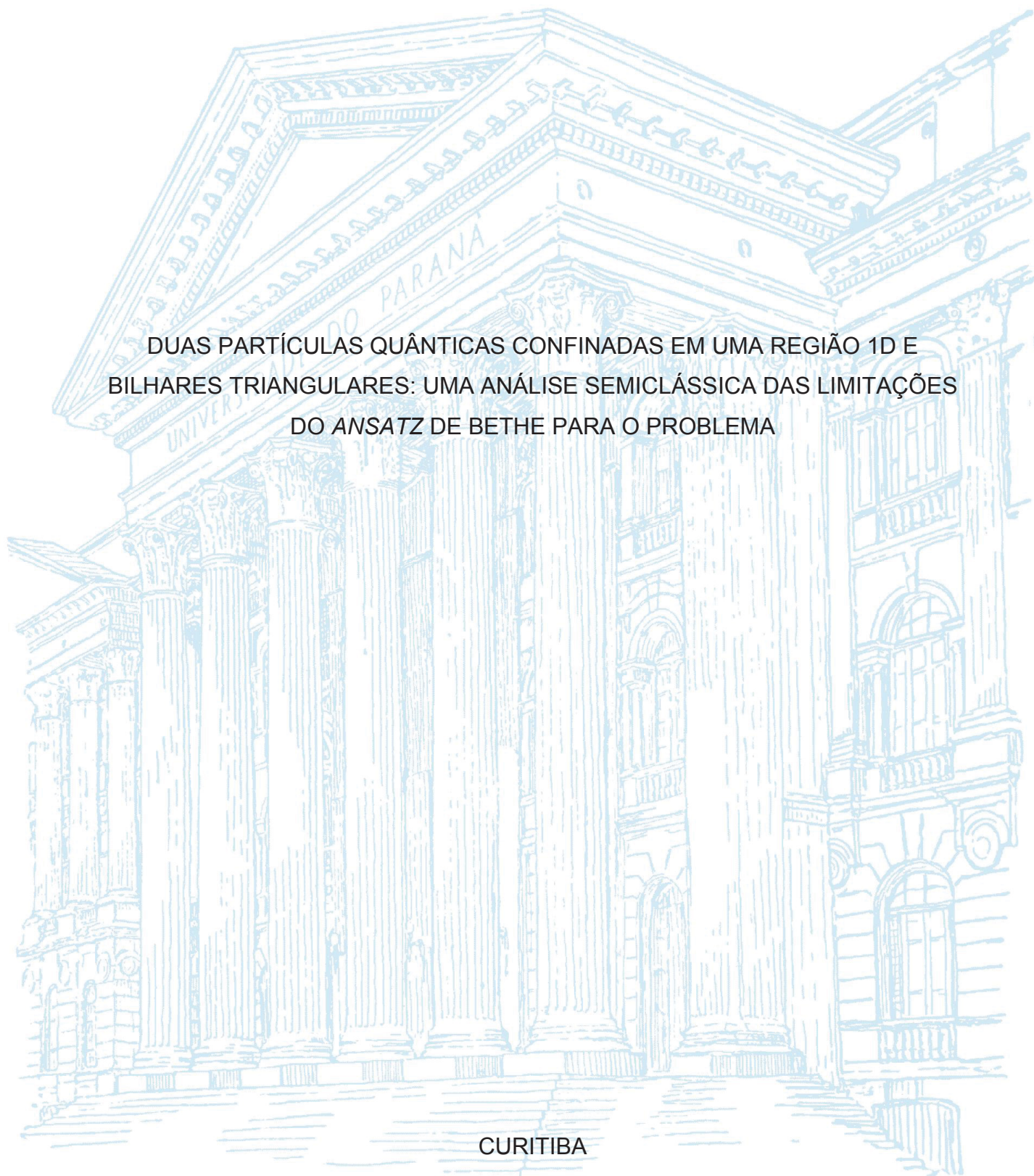
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

ADAM LUIZ DE AZEVEDO

DUAS PARTÍCULAS QUÂNTICAS CONFINADAS EM UMA REGIÃO 1D E
BILHARES TRIANGULARES: UMA ANÁLISE SEMICLÁSSICA DAS LIMITAÇÕES
DO ANSATZ DE BETHE PARA O PROBLEMA

CURITIBA

2020



ADAM LUIZ DE AZEVEDO

DUAS PARTÍCULAS QUÂNTICAS CONFINADAS EM UMA REGIÃO 1D E
BILHARES TRIANGULARES: UMA ANÁLISE SEMICLÁSSICA DAS LIMITAÇÕES
DO ANSATZ DE BETHE PARA O PROBLEMA

Tese apresentada ao curso de Pós-Graduação em Física, Setor de Ciências Exatas da Universidade Federal do Paraná, como requisito parcial à obtenção do título de Doutor em Física.

Orientador: Prof. Dr. Marcos Gomes Eleutério da Luz

CURITIBA

2020

Catálogo na Fonte: Sistema de Bibliotecas, UFPR
Biblioteca de Ciência e Tecnologia

A994d

Azevedo, Adam Luiz de

Duas partículas quânticas confinadas em uma região 1D e bilhares triangulares: uma análise semiclássica das limitações do Ansatz de Bethe para o problema [recurso eletrônico] / Adam Luiz de Azevedo. – Curitiba, 2020.

Tese - Universidade Federal do Paraná, Setor de Ciências Exatas, Programa de Pós-Graduação em Física, 2020.

Orientador: Marcos Gomes Eleutério da Luz.

1. Partículas (Física nuclear). 2. Difração. 3. Ferromagnetismo. I. Universidade Federal do Paraná. II. Luz, Marcos Gomes Eleutério da. III. Título.

CDD: 523.019

Bibliotecária: Vanusa Maciel CRB- 9/1928

TERMO DE APROVAÇÃO

Os membros da Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em FÍSICA da Universidade Federal do Paraná foram convocados para realizar a arguição da tese de Doutorado de **ADAM LUIZ DE AZEVEDO** intitulada: **"Duas partículas quânticas confinadas em uma região 1D e bilhares triangulares: uma análise semiclássica das limitações do Ansatz de Bethe para o problema"**, sob orientação do Prof. Dr. MARCOS GOMES ELEUTÉRIO DA LUZ, que após terem inquirido o aluno e realizada a avaliação do trabalho, são de parecer pela sua APROVAÇÃO no rito de defesa. A outorga do título de doutor está sujeita à homologação pelo colegiado, ao atendimento de todas as indicações e correções solicitadas pela banca e ao pleno atendimento das demandas regimentais do Programa de Pós-Graduação.

CURITIBA, 31 de Março de 2020.

Avaliador Externo (UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA)

Assinatura Eletrônica

31/03/2020 16:34:35.0

MARCOS GOMES ELEUTÉRIO DA LUZ

Presidente da Banca Examinadora (UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ)

Assinatura Eletrônica

31/03/2020 16:34:35.0

CESAR ROGERIO DE OLIVEIRA

Avaliador Externo (UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS)

Assinatura Eletrônica

31/03/2020 16:35:45.0

THIAGO DE LIMA PRADO

Avaliador Interno (UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ)

Assinatura Eletrônica

31/03/2020 16:34:28.0

LUIS GUILHERME DE CARVALHO REGO

Avaliador Externo (UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA)

Dedico este trabalho aos meus pais, Luiz Danilo de Azevedo e Maria de Lourdes Baggio de Azevedo, e ao meu caro amigo, Jefferson Stafusa Elias Portela.

AGRADECIMENTOS

- Ao Prof. Dr. Marcos Gomes Eleutério da Luz pela sua orientação, suas observações técnicas pertinentes e seu apoio imprescindível ao longo desses anos de trabalho conjunto;
- Ao Prof. Dr. Fábio Marcel Zanetti pela colaboração com os gráficos dos resultados numéricos e pela disponibilidade e prontidão em realizar as mudanças no *layout* do seus gráficos, conforme as recomendações da banca de defesa de doutorado;
- Ao meu amigo de longa data, Dr. Jefferson Stafusa Elias Portela, pelo auxílio com o *layout* das figuras, com dicas de comandos de latex em situações críticas, pelas sugestões textuais e revisão do texto em inglês no Abstract;
- Aos meus professores da Graduação e da Pós-graduação em Física;
- Aos membros das bancas dos exames de qualificação (parte I e parte II) e de defesa de doutorado pelas sugestões e observações;
- Aos meus colegas pós-graduandos em Física;
- À secretária Gislaïne Klemba (até 2017) e ao secretário Leandro Camilo Florentino (a partir de 2017), ambos da Pós-graduação em Física, pelo apoio administrativo;
- Ao Prof. Dr. Mauro Gomes Rodbard, o ponto de partida da minha trajetória no curso de Física que, em 1997, ainda como estudante do atual Ensino Médio e indeciso qual curso escolher, me recepcionou muito bem em sua sala e foi um importante incentivador quando fui seu aluno em Física Experimental A em 1999, estando disponível em tirar dúvidas em sua sala e permitindo, quando fosse possível, refazer as aulas experimentais no contraturno;
- Ao apoio da minha família, Luiz Danilo de Azevedo e Maria de Lourdes Baggio de Azevedo;
- À sociedade brasileira que, por meio dos impostos, assegurou a minha formação acadêmica em dedicação exclusiva ao longo desses anos;
- À CAPES pelo apoio financeiro.

RESUMO

Sistemas quânticos integráveis unidimensionais, como redes de spin e gases quânticos, são bem descritos por uma superposição finita de ondas planas, denominada *Ansatz* de Bethe. Tais sistemas com muitas partículas compartilham a característica de suas interações serem fatoráveis em várias interações de dois corpos, possuem simetria de grupos de reflexão e serem formados, em sua maioria, por partículas de massas iguais. Os sistemas com massas diferentes solúveis por *Ansatz* de Bethe encontrados na literatura são restritos a partículas impenetráveis para preservar a estrutura de grupo de reflexão. Como essa justificativa não é suficientemente explorada, desenvolvemos uma descrição semiclássica para o sistema de duas partículas em uma caixa unidimensional (1D) para entender melhor as restrições à aplicabilidade do *Ansatz* de Bethe para massas diferentes. Essa descrição semiclássica consiste em construir uma função de onda do tipo *Ansatz* de Bethe estendida para razões de massas γ geradoras de conjuntos finitos de momentos nas sucessivas colisões clássicas das partículas. Essa função de onda estendida foi aplicada para o caso classicamente integrável $\gamma = 3$ e foi observado que ela satisfaz as condições de contorno apenas no limite de potencial infinito. Como isso não foi suficiente para inferir se esse caso é, ou não, quanticamente integrável, propomos um modelo para calcular o *genus* do bilhar correspondente (retângulo com parede permeável em sua diagonal), que permitiu mostrar que ele é pseudointegrável. Isso vale para todos os bilhares correspondentes as demais razões de massas $\gamma \neq 1$. Com a expressão do *genus*, foi possível representar a função de onda do tipo *Ansatz* de Bethe como uma soma infinita de ondas planas no limite do *genus* infinito, concordando com a Conjectura de Berry.

Palavras-chave: *Ansatz* de Bethe, Duas partículas, Bilhar.

ABSTRACT

One-dimensional integrable quantum systems, such as spin networks and quantum gases, are well described by a finite superposition of plane waves, the so-called Bethe Ansatz. Such many-particle systems share a number of characteristics, such as: their interactions being factorable into two-body interactions, displaying reflection symmetries, and, for the most part, consisting of particles of equal masses. Systems with different masses found to be soluble by the Bethe Ansatz are restricted to impenetrable particles, in order to preserve the reflection group structure. The extent to which this requirement is necessary or sufficient is not sufficiently explored, we developed a semiclassical description for the two-particle system in one-dimensional box (1D) in order to better understand the restrictions on the applicability of Bethe Ansatz for systems with different masses. This semiclassical description consists in applying a wave function of the type Bethe Ansatz to mass ratios γ that generate finite sets of momenta in the successive classical collisions of particles. We find that this extended wave function, when applied to the classically integrable case $\gamma = 3$, satisfies the boundary conditions only at the limit of infinite potential. As this result is inconclusive with respect to the system's quantum integrability, we proceeded to calculate the genus of the corresponding billiards (rectangles with permeable diagonal walls), which allowed us to demonstrate the system to be pseudointegrable. This is true for all billiards corresponding to any $\gamma \neq 1$ mass ratios. Using the genus expression, we could write the Bethe Ansatz wave function as an infinite sum of plane waves in the limit of infinite genus, in agreement with Berry Conjecture.

Keywords: Bethe Ansatz, Two particles, Billiard.

SUMÁRIO

1	Introdução	10
2	Conceitos Básicos	18
2.1	Bilhares	18
2.1.1	Bilhares Poligonais Clássicos	20
2.1.2	O Método <i>Unfolding</i>	22
2.1.3	Bilhares Poligonais com Barreiras	28
2.1.4	Bilhares Poligonais Quânticos	29
2.2	O Modelo de Lieb-Liniger	43
2.3	O Modelo de Michel Gaudin	46
3	Aspectos Essenciais da Dinâmica Clássica	53
3.1	O Sistema Clássico de Duas Partículas em uma Caixa 1D Finita	53
3.2	A Correspondência entre o Sistema de Duas Partículas na Caixa 1D e o Bilhar Triângulo Retângulo	55
3.3	Estados Interpretados como Números Complexos	58
3.4	O Conjunto de Estados e suas Propriedades	64
4	O Sistema Quântico e um <i>Ansatz</i> de Bethe Estendido	68
4.1	Equação de Schrödinger para Duas Partículas em Coordenadas e Números de Onda Normalizados	69
4.1.1	Análise da Solução para o Caso de Duas Partículas não Confinadas	70
4.1.2	A Simetria de Reflexão Espacial Contida na Solução Base da Função de Onda	77
4.2	Proposta de Função de Onda: <i>Ansatz</i> de Bethe Estendido	78
4.2.1	Análise das Condições $\Psi^-(0, x_2) = 0$ e $\Psi^+(x_1, 0) = 0$	81
4.2.2	Função de Onda para $\gamma = 1$	86
4.2.3	Função de Onda para $\gamma = 3$	93
4.2.4	Breve Descrição do Cálculo Numérico do Caso $\gamma = 3$ e Algumas Soluções Específicas	98
4.2.5	Abordagens Analíticas Alternativas na Tentativa de Obtenção da Função de Onda para $\gamma = 3$	100
4.2.6	E as Soluções para Outros Bilhares Triângulo Retângulo Racionais?	110
5	Difração, <i>Genus</i> e Bilhares com Paredes Permeáveis	119
5.1	Ausência de Difração em Cunhas com Ângulo de Abertura $\frac{\pi}{n_1}$	120

5.2	O <i>Genus</i> para Bilhares Triângulo Retângulo	124
5.3	Número de Estados Clássicos em Função do <i>Genus</i>	127
5.4	Uma Proposta para o Cálculo do <i>Genus</i> para Bilhares com Paredes Permeáveis	131
5.4.1	O <i>Genus</i> de Bilhares Retangulares com Parede Permeável	131
5.4.2	Estatística de Níveis de Energia Vizinhos para Bilhares não Integráveis com Parede Permeável	135
6	Conclusão	137
A	Integrabilidade em Mecânica Clássica	142
B	Grupo Diedral	145
B.1	Grupo	145
B.2	Grupo Diedral	145
B.3	Grupo Multiplicativo Cíclico	146
C	Cálculo do <i>Genus</i> para Alguns Bilhares Poligonais em Termos do Número de Faces, de Arestas e de Vértices	147
C.1	Bilhar Quadrado	147
C.2	Bilhar Triângulo Retângulo Isósceles	148
C.3	Bilhar Triângulo Hemiequilátero	149
C.4	Bilhar Triângulo Retângulo de Ângulo $\frac{\pi}{8}$	150
D	Reflexão Especular no Bilhar Triângulo Retângulo	152
E	Ilustração da Vantagem da Notação Complexa sobre a Matricial	156
F	Hamiltoniano Clássico e Quântico de Duas Partículas Confinadas em uma Caixa 1D em Função das Coordenadas de Centro de Massa e Relativa	158
F.1	O Hamiltoniano Clássico	158
F.2	O Hamiltoniano Quântico	161
G	Demonstração de que a Função de Onda Base Preserva a Continuidade, a Descontinuidade da Derivada Primeira e Satisfaz a Equação de Schrödinger	164
	Referências Bibliográficas	167

Introdução

O desenvolvimento da Mecânica Quântica no início do século XX promoveu avanços no entendimento de vários fenômenos físicos onde a teoria clássica falhou no aporte teórico. Um exemplo disso é o ferromagnetismo que, assim como o magnetismo, é um fenômeno físico essencialmente quântico, por ter a sua origem no *spin* do elétron e pela proibição de elétrons com o mesmo *spin* compartilharem o mesmo estado de energia (Princípio de Exclusão de Pauli). Isso significa que, se elétrons tiverem *spin* paralelos ou antiparalelos, a sua localização no orbital atômico será afetada, mudando a intensidade de interação eletrostática entre eles e, por conseguinte, na diferença de energia nos dois estados eletrônicos.

Um dos primeiros estudos sobre ferromagnetismo nesse contexto quântico foi realizado por Hans A. Bethe (1906-2005) em 1931 [1], através de um modelo unidimensional (1D) de metal, consistindo em um arranjo (ou cadeia) linear, finito, periódico e isotrópico de N partículas de *spin*- $\frac{1}{2}$, fixamente posicionadas, que interagem apenas entre os seus vizinhos muito próximos¹. Para se determinar os autoestados e autovalores desse problema, H. Bethe desenvolveu um método consistindo em se supor que a função de onda exata do sistema seja uma superposição finita de ondas planas. Isso faz sentido fisicamente, uma vez que a interação das partículas é apenas entre seus vizinhos próximos, de maneira que a onda de *spin* (mágnon) entre elas se comporte como uma “partícula livre”, que é bem descrita quanticamente como uma onda plana. Este método foi posteriormente denominado de *Ansatz* de Bethe por C. N. Yang. *Ansatz* é uma palavra de origem germânica significando suposição, hipótese ou palpite. Então, o *Ansatz* de Bethe² é um palpite de

¹Esse modelo é denominado de modelo de Heisenberg isotrópico ou modelo de Heisenberg XXX.

²Além disso, o *Ansatz* de Bethe é denominado, em inglês, como *Coordinate Bethe Ansatz*, cuja tradução seria como *Ansatz* de Bethe em coordenadas ou coordenada. Essa diferenciação de nomenclatura é importante, pois há uma versão para segunda quantização do *Ansatz* de Bethe original denominada de

solução a ser verificado posteriormente.

No entanto, esse problema poderia ser resolvido diagonalizando-se a matriz representando o hamiltoniano, como usualmente é feito. Nesse sentido, qual teria sido a motivação de H. Bethe a propor o seu *Ansatz* para resolver o problema? O próprio H. Bethe não justificou claramente o motivo [2], mas M. Karbach e G. Muller explicam qualitativamente o porquê em [3]. Esboçemos a explicação deles.

Antes de se diagonalizar efetivamente o hamiltoniano, por razões de eficiência computacional, é interessante expressá-lo como uma matriz em blocos (subespaços invariantes) ao longo da sua diagonal principal. A base conveniente é aquela formada por N vetores ortogonais representando *spin up* e *spin down*. Para o primeiro bloco, escolhe-se como base desse subespaço o vetor cujos componentes³ são os N *spin up*, ou seja, esse subespaço é 1D e corresponde ao estado de referência ou fundamental do sistema. Para o bloco seguinte, a base de vetores conveniente é aquela onde componentes desses vetores têm um único *spin down*, $|j\rangle$, em que $j \in \{1, \dots, N\}$. Então, esse subespaço terá dimensão N . Para diagonalizá-lo, usa-se a simetria translacional do sistema, para obtermos vetores da base,

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{ikj} |j\rangle, \quad (1.1)$$

translacionalmente invariantes, em que k é o número de onda e i é a unidade imaginária. Para os demais blocos, acrescenta-se, em cada um deles, um componente de *spin down* até se exaurir os N componentes. Entretanto, a simetria translacional, mesmo quando combinadas com as simetrias rotacional de *spin* e de reflexão na cadeia, não é mais suficiente para se diagonalizar completamente o hamiltoniano [3].

Lembrando-se que apenas partículas muito próximas interagem entre si, a Eq. (1.1) pode ter sido o vislumbre que H. Bethe teve para propor a sua generalização [4,5]

$$|\psi\rangle = \sum_{1 \leq j_1 < \dots < j_r \leq N} a(j_1, \dots, j_r) |j_1, \dots, j_r\rangle, \quad (1.2)$$

em que $|j_1, \dots, j_r\rangle$ é um estado correspondente a r *spin down*,

$$a(j_1, \dots, j_r) = \sum_{\mathcal{P} \in S_r} A_{\mathcal{P}} \exp \left(i \sum_{l=1}^r k_{\mathcal{P}l} j_l \right),$$

Algebraic Bethe Ansatz. Não trataremos dele aqui.

³Conforme o Grande Dicionário da Língua Portuguesa, de Antônio Houaiss, esse vocábulo é um substantivo masculino quando significa parte de um todo, apesar do uso frequente como substantivo feminino por vários autores.

é uma superposição finita de ondas planas, \mathcal{P} é um elemento do grupo de permutação S_r , $A_{\mathcal{P}}$ é a amplitude das ondas planas e $k_{\mathcal{P}l}$ é o número de onda, que é essencialmente o seu *Ansatz*. Com o auxílio da equação de Schrödinger e as condições de contorno do problema, determinam-se os coeficientes $A_{\mathcal{P}}$ e, por fim, os autovetores e autovalores exatos do sistema. Como os *spin* vizinhos interagem entre si, as respectivas amplitudes $A_{\mathcal{P}}$ e $A_{\mathcal{P}'}$, com $\mathcal{P} \neq \mathcal{P}'$, adquirem uma diferença de fase devido ao espalhamento de ondas de *spin*, análogo a um espalhamento de duas partículas. Isso significa, então, que o *Ansatz* de Bethe fatora um problema de muitos corpos interagentes em vários problemas de dois corpos interagentes. Esse resultado pode ser considerado como a ideia básica para definir integrabilidade quântica no presente contexto [5, 6]. Para algumas definições mais gerais de integrabilidade em Mecânica Quântica, considere as seguintes referências [7–9].

Perceba que o *Ansatz* de Bethe é, efetivamente, uma mudança de base conveniente, que conduz à diagonalização exata do problema. Os detalhes referentes aos cálculos da Eq. (1.2) podem ser encontrados nos livros de M. Gaudin [4, 5] e M. Takahashi [10].

Apesar do *Ansatz* de Bethe na forma como fora publicado em [1] não ter uma fundamentação rigorosa, ele tornou-se seminal, pois ofereceu um novo olhar na revisitação tanto de problemas com soluções pouco acuradas, ou sem soluções, quanto na formulação de novos problemas. Em vista disso, é comum em publicações sobre o tema que o *Ansatz* de Bethe esteja adaptado de acordo com as particularidades do problema, mas mantendo intacta a ideia original de alguma maneira, como as suas extensões termodinâmica e de segunda quantização. Há também um esforço concomitante de fundamentá-lo rigorosamente, como a identificação da sua estrutura com Álgebras de Lie [11] e Grupos Quânticos [12, 13]. A seguir, daremos um panorama dos problemas mais relevantes abordados pelo *Ansatz* de Bethe.

Após a sua publicação em 1931, Lamek Hulthén (1909-1995) estudou a versão anti-ferromagnética do modelo de Heisenberg em seu doutorado [14], no qual ele determinou, via *Ansatz* de Bethe, a energia do estado fundamental por sítio de ocupação de *spin* e os números de onda no limite de comprimento infinito dessa cadeia.

Em 1963, Elliot H. Lieb e Werner Liniger (1927-2017) usaram o *Ansatz* de Bethe para encontrar a função de onda e os autovalores de energia exatos para um sistema de N bósons sem *spin*, interagentes por um potencial repulsivo delta de Dirac, de intensidade finita e confinadas em uma região 1D sujeita a condições de contorno periódicas [15, 16]. Ao contrário do modelo de Heisenberg, esse sistema é um arranjo de partículas em movimento, que podem tanto ser transmitidas, quanto colididas elasticamente entre si. Esse sistema é conhecido como modelo de Lieb-Liniger. Além disso, no limite termodinâmico (número de

partículas e extensão da região 1D infinitos, mas mantendo a densidade finita), esse modelo recupera resultados previstos pela teoria perturbativa de Bogoliubov para intensidades fracas de potencial de interação. Esse resultado foi muito importante à época, pois se careciam de modelos satisfatórios de muitas partículas para se entender, por exemplo, gases e líquidos, constituídos por partículas interagentes por potenciais de dois corpos.

Em 1960, Marvin D. Girardeau (1930-2015) [17] mostrou que o espectro de autovalores de energia para bósons interagentes sem *spin* coincide com o espectro de autovalores para férmions sem *spin* não interagentes à medida que se aumenta a intensidade de interação dos bósons, pois eles tendem a evitar a ocupação do mesmo estado quântico de energia nessas circunstâncias. Esse resultado se mantém válido também para o caso de bósons e férmions de *spin*- $\frac{1}{2}$ impenetráveis [18]. Dualidade análoga foi demonstrada mais de 30 anos depois em [19], no qual férmions fortemente (fracamente) interagentes correspondem a bósons fracamente (fortemente) interagentes, enquanto J. B. McGuire resolveu o problema semelhante para um gás formado por $N - 1$ férmions com *spin up* e um férmion com *spin down* para interação de contato repulsiva [20] e atrativa [21].

Percebendo que todos os problemas de muitos corpos até então resolvidos por *Ansatz* de Bethe são espacialmente periódicos e as interações locais entre as partículas são permutações de *spin* ou de momento, Chen Ning Yang conseguiu reinterpretar esses modelos como um problema matricial de autovalores, utilizando-se uma representação irredutível do grupo de permutação [22, 23]. As colunas dessas matrizes correspondem a autovetores antes e depois da interação local das partículas; além disso, cada coluna é expressível em termos de qualquer outra coluna dessa matriz. Teremos, então, uma sequência de matrizes de espalhamento para relacionar esses dois autovetores, obtendo-se uma sequência temporal dessas interações. Isso mostra a fatoração do problema de N corpos interagentes como vários problemas de dois corpos, como esperado. As matrizes que conectam esses autovetores satisfazem uma relação conhecida atualmente como equação de Yang-Baxter [24], pois foi obtida também por Rodney J. Baxter [25, 26] na determinação da função partição do modelo de 8-vértices⁴. Essa equação mostra que o resultado final de um espalhamento independe da sequência de colisões ou transmissões binárias que o originou. Em [28], C. N. Yang mostrou que a matriz de espalhamento para esse problema de N corpos é unitário e simétrico, tanto para o caso de interação repulsiva, quanto para a atrativa.

Com essa generalização, C. N. Yang e C. P. Yang desenvolveram uma descrição termodinâmica de equilíbrio para o modelo de Lieb-Liniger [29], permitindo, através de uma

⁴Esse foi o primeiro modelo de rede bidimensional resolvido exatamente. A origem da equação de Yang-Baxter remonta da relação triângulo estrela mencionada no modelo Ising em 1944 por L. Onsanger [27].

generalização da equação de Fredholm, o cálculo do espectro excitado de energia para qualquer temperatura, inaugurando o que é denominado hoje de *Ansatz* de Bethe Termodinâmico. Além disso, foi possível determinar, por exemplo, o espectro de energia de um gás 1D com férmions e bósons misturados interagindo por potencial delta de Dirac [30,31] e, recentemente, as funções correlação de equilíbrio e fora de equilíbrio para o gás de bósons 1D [32].

Michel Gaudin, em 1971, resolveu o problema de N bósons interagindo por um potencial delta de Dirac confinados em um intervalo $I = [0, L]$ [33]. Excluindo a condição de contorno periódica, ele definiu as funções de onda do modelo de Lieb-Liniger como sendo soluções elementares, válidas em todo o intervalo real. Em seguida, ele superpôs todas as funções de onda elementares e impôs o anulamento da função de onda resultante na extremidade 0 do intervalo $[0, \infty)$, obtendo uma solução *Ansatz* de Bethe para a semirreta. A condição de anulamento imposta na extremidade em L do intervalo I conduz à solução *Ansatz* de Bethe para a caixa e à quantização sobre os momentos das partículas. Gaudin percebeu também que a solução *Ansatz* de Bethe para a reta real e a semirreta possuem a simetria de um grupo de reflexão e mostrou que essa superposição de ondas planas é, na realidade, uma soma sobre elementos desse grupo. Desse modo, a superposição de elementos de um grupo de reflexão qualquer é uma solução do tipo *Ansatz* de Bethe estendida, mas, como apontado por M. Gaudin, seria difícil interpretá-la fisicamente. Essa conclusão de Gaudin indica que apenas sistemas físicos com alguma simetria de reflexão atrelada à superposição finita de ondas planas, implica na integrabilidade do sistema físico, como demonstrado por Bill Sutherland e Eugene Gutkin [34, 35]. Entretanto, sistemas físicos integráveis não implicam em uma solução por *Ansatz* de Bethe, como é o caso do Oscilador Harmônico Quântico e alguns sistemas com potenciais de interação de longo alcance⁵ [11, 36], ou mesmo o modelo de Rabi [9]. A relação entre grupos de reflexão, *Ansatz* de Bethe e integrabilidade também tem sido estendido para partículas interagindo por potenciais de contato generalizados [37–39], em uma semirreta [40] e em poços de potenciais finitos com bósons [41] e férmions de $spin-\frac{1}{2}$ [42].

A fim de confirmar previsões teóricas dos modelos por *Ansatz* de Bethe, realizações experimentais foram possíveis apenas após o desenvolvimento de técnicas que levaram à reprodução experimental dos Condensados de Bose-Einstein em 1995 [43]. Mais especificamente, para se reproduzir um gás de Bose 1D, cria-se um gás atômico ultrafrio, cujas partículas interagem por um potencial de curto alcance, através de um aprisionamento óptico tridimensional. Ajustando-se devidamente esse aprisionamento por ressonância, é

⁵Apesar de serem de longo alcance, decaem rapidamente para distâncias crescentes [24].

possível “congelar” o movimento das partículas apenas em duas direções (radial), reproduzindo, assim, um gás de bósons confinado em uma caixa 1D (direção axial) [44–46]. Dois casos limites puderam ser confirmados: no acoplamento fraco, os bósons interagem fracamente entre si, comportando-se semelhantemente a um condensado de Bose-Einstein [47] (quase-Condensado de Bose-Einstein); e no acoplamento forte (gás de Tonks-Girardeau), os bósons interagem quase como partículas rígidas, comportando-se como férmions pouco interagentes [48]. Além disso, foi observado acordo satisfatório entre os resultados experimentais e as expansões assintóticas nesses dois tipos de acoplamentos [44].

Para citar mais alguns exemplos sobre o uso do *Ansatz* de Bethe em problemas de muitos corpos, temos a cadeia de *spin* anisotrópica [49–51], aprofundando o entendimento do ferromagnetismo, o modelo de Hubbard [52–55], que descreve a correlação de elétrons fortemente interagentes e o modelo BCS (Bardeen-Cooper-Schrieffer), que descreve propriedades supercondutoras [56, 57].

Os sistemas físicos resolvíveis por *Ansatz* de Bethe mencionados até aqui compartilham o fato de serem formados, em geral, por partículas indistinguíveis (mesma massa e mesmo *spin*). Apenas para alguns casos especiais de partículas impenetráveis com massas diferentes que o *Ansatz* de Bethe é aplicável [58–60], pois essa restrição preserva a simetria de reflexão nas interações. Uma maneira para se entender as restrições de aplicabilidade do *Ansatz* de Bethe seria em termos semiclássicos, mas não foi encontrada uma teoria geral para isso no estudo bibliográfico pertinente a esse trabalho. Note que esse método, expresso pela Eq. (1.2), está relacionado com processos de espalhamento de múltiplas partículas, inclusive tunelamento, mas sem nenhuma associação com fenômenos puramente clássicos. Mas isso não significa que análises semiclássicas em tal contexto não possam ser feitas, como comprovam diferentes trabalhos abordando sistemas específicos [61–64]. Isto posto, torna-se relevante uma abordagem semiclássica que expusesse as limitações do método.

Em vista disso, a motivação desta tese é compreender mais profundamente as restrições da aplicabilidade do *Ansatz* de Bethe em sistemas formados por partículas de massas diferentes e, conseqüentemente, também a integrabilidade em sistemas quânticos. Para tanto, escolhemos o sistema de duas partículas de massas diferentes, interagindo por um potencial delta de Dirac em uma caixa 1D. Esse sistema é interessante para o nosso objetivo porque, classicamente, ele gera uma quantidade finita de momentos para certos valores de razão de massas das partículas [65, 66] e, a associação de cada par de momentos a uma onda plana, possibilita-nos construir uma função de onda do tipo *Ansatz* de Bethe estendida. Aqui estendida significa que temos uma regra extra para selecionar os

componentes da expansão em ondas planas. Esses componentes devem ser selecionados seguindo certas simetrias que aparecem no sistema clássico. Portanto, por construção, temos um *Ansatz* de Bethe incorporando explicitamente ideias comuns de aproximações semiclássicas, o que nos permite, enfim, fazer uma interpretação semiclássica dos resultados obtidos. Para investigar a compatibilidade da função de onda estendida com as condições de contorno do nosso sistema, estendemos a metodologia usada no modelo de Gaudin [33].

Vale citar também que sistemas físicos 1D com N partículas confinadas, com interações como aquelas consideradas por Gaudin, são interessantes por serem equivalentes a um sistema N dimensional confinando uma única partícula, ou seja, um bilhar. Assim, a solução de um problema 1D leva à solução de um problema N dimensional. No caso particular de duas partículas impenetráveis quaisquer, confinadas e interagindo elasticamente entre si, o bilhar correspondente é um triângulo retângulo [67]. Agora, se essas duas partículas puderem tunelar entre si, o bilhar correspondente é um retângulo com uma parede diagonal permeável. Essa equivalência é discutida no Capítulo 3 e norteará a abordagem do nosso problema. Esse ponto de vista tem a vantagem de se usar várias ferramentas normalmente consideradas para se discutir a correspondência clássica-quântica entre bilhares, de acordo com o *Ansatz* de Bethe em sua forma original, mas discutindo aqui os problemas surgidos quando consideramos sistemas de massas distintas.

A tese está organizada da seguinte maneira:

- No Capítulo 2, começamos abordando bilhares poligonais clássicos e quânticos para uma discussão apropriada de integrabilidade clássica e como definir adequadamente integrabilidade quântica. Em seguida, explicamos o *Ansatz* de Bethe através do modelo de Lieb-Liniger por ser mais simples que o modelo de Heisenberg e também por ser a base para o modelo de M. Gaudin, explicado subsequentemente.
- No Capítulo 3, apresentamos a descrição clássica geral de como são gerados os momentos pelas duas partículas interagindo elasticamente na caixa 1D [66]. Essa informação é essencial na construção da função de onda na versão quântica do sistema. Os resultados obtidos neste trabalho encontram-se nos capítulos 4 e 5.
- No Capítulo 4, resolvemos a equação de Schrödinger conforme a separabilidade do problema de dois corpos, obtendo-se uma solução base para compor a função de onda estendida do tipo *Ansatz* de Bethe. Analisamos, então, dois casos classicamente integráveis quando as partículas têm razões de massas $\gamma = 1$ e $\gamma = 3$, e um caso classicamente pseudointegrável, $\gamma = \frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}-1}$. O caso $\gamma = 1$ serve para verificar a consistência da nossa análise com resultados já conhecidos [33]. O segundo caso, embora classicamente integrável, não

admite uma função de onda do tipo *Ansatz* de Bethe, pois não é possível satisfazer as condições de contorno do sistema, exceto no limite de partículas impenetráveis. Usando a reflexão do domínio da função de onda, obtemos um bilhar pipa (*kite*), que é um contra-exemplo da suficiência da simetria de reflexão para se ter uma solução do tipo *Ansatz* de Bethe. Já o terceiro caso é previsível que não haja uma solução por *Ansatz* de Bethe, pois o bilhar triangular, que forma o bilhar retangular com parede permeável em sua diagonal, nem mesmo é integrável nas acepções clássica e quântica. Assim, a aplicação da função de onda estendida mostra inconsistências com as condições de contorno semelhantes ao caso $\gamma = 3$. Além disso, mostramos que não é possível obter analiticamente uma condição de quantização para bilhares pseudointegráveis como esse.

- No Capítulo 5, mostramos a ausência de espalhamento difrativo para cunhas de ângulos de abertura com numerador igual a um, que é uma das condições para que o sistema seja quanticamente integrável. Em seguida, simplificamos a equação para o cálculo do *genus* para bilhares triângulo retângulo, explicitando que as propriedades dinâmicas e topológicas dependem fundamentalmente de apenas um dos seus ângulos internos agudos. Consequentemente, isso estabelece uma hierarquia de complexidade na expansão da função de onda estendida em termos do valor do *genus*. E, por fim, apresentamos um modelo inspirado nas ideias de P. J. Richens e M. V. Berry em [68] para determinar o *genus* de bilhares quânticos com parede permeável, que explica o insucesso do caso $\gamma = 3$ de admitir uma solução do tipo *Ansatz* de Bethe. Esse resultado é inédito na literatura, sendo uma das principais contribuições desta tese.

- Finalmente, no Capítulo 6 tecemos as considerações finais da presente tese.

Conceitos Básicos

2.1 Bilhares

Bilhar é um sistema dinâmico formado por uma região geométrica euclidiana fechada, que confina uma única partícula em movimento uniforme até ser refletida pela fronteira geométrica.

A ideia de bilhar teve papel fundamental na investigação da Hipótese Ergódica¹ para o gás de Lorentz, no qual elétrons não interagentes entre si colidem repetidamente com núcleos atômicos (veja a Fig. 2.1(a)). Em vista disso, como os elétrons são muito menores que esses núcleos, Yakov G. Sinai propôs o modelo de um bilhar quadrado com uma região circular removido do seu centro; na região interna do quadrado e externa à circunferência, uma única partícula realiza um movimento uniforme até ser refletida nas fronteiras geométricas. A região circular representa um núcleo atômico e a partícula, o elétron (veja a Fig. 2.1(b)). Sinai mostrou que esse bilhar é ergódico [69, 70] e, conseqüentemente, o gás de elétrons também.

Os bilhares têm sido modelos simples e eficientes no estudo de ergodicidade, integrabilidade, caos [71, 72], limite clássico-quântico [68], aprisionamento atômico [73], retificação de condutância térmica em materiais [74], efeito da geometria de bilhares semicondutores sobre a magnetoresistência [75], etc.

A definição de bilhar mencionada inicialmente, por conta de sua simplicidade, é preferida em estudos com teor mais abstrato e é a usual. Além disso, ela tem o intuito de

¹Essencialmente, a Hipótese Ergódica afirma que todos os pontos acessíveis do espaço de fase são acessados pela dinâmica do sistema no limite do tempo infinito, de tal maneira que o valor médio de uma grandeza física qualquer seja igual ao valor médio temporal dessa mesma grandeza.

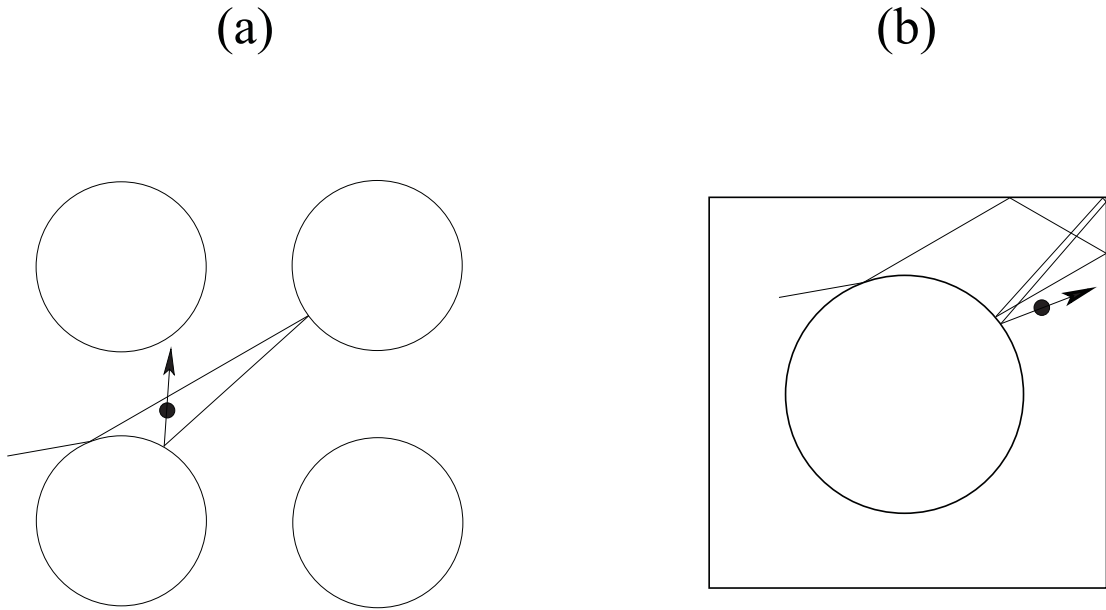


Figura 2.1: (a) Gás de Lorentz: um elétron colide sucessivamente com os núcleos atômicos. (b) Bilhar de Sinai: as sucessivas colisões do elétron podem ser representadas em um bilhar.

simplificar a análise de um sistema de muitos corpos em uma dimensão para um problema de um corpo em uma região geométrica multidimensional (pois, em princípio, é mais fácil tratar um sistema com uma única partícula), de modo que a sua forma geométrica corresponda à natureza do potencial de interação das partículas. No entanto, encontram-se na literatura outras definições diferentes de bilhares, podendo ser de geometria não euclidiana (bilhar de Hadamard² [76], o bilhar de Artin [77]), ser aberto [78–80], ter mais de uma partícula [81–84], ter obstáculos, barreiras [85–87] e barreiras permeáveis [88], com reflexões não especulares [89] e relativísticos [90–92]. Esses exemplos mostram que o estudo de bilhares é uma área de pesquisa em pleno desenvolvimento. A menos de menção explícita, nos restringimos à definição usual de bilhar.

Agora, tratemos a respeito de bilhares no contexto da Mecânica Clássica. Como mencionamos, bilhares são modelos usados no estudo do comportamento dinâmico de regularidade e caos e podem ser classificados em três tipos básicos [93]:

Bilhares hiperbólicos: caracterizados pela dispersão exponencial de órbitas vizinhas e, por isso, apresentam expoente de Lyapunov positivo [71]. Esse é o caso do Bilhar de Sinai e o Bilhar de Bunimovich ou Estádio;

Bilhares elípticos: caracterizados por (quase) não haver dispersão de órbitas vizinhas (dispersões de órbitas, quando houver, é mais lenta que uma dispersão polinomial). Bilhares elípticos é um exemplo;

²O primeiro a ser provado que é caótico, em 1898.

Bilhares parabólicos: caracterizados por apresentar uma dispersão polinomial de órbitas vizinhas, pois sua origem se deve essencialmente à presença de vértices. Desse modo, o seu expoente de Lyapunov também é nulo. Como exemplo, temos os bilhares poligonais.

Como o nosso sistema de interesse aqui está relacionado a um bilhar triângulo retângulo, nos limitemos apenas aos bilhares poligonais.

2.1.1 Bilhares Poligonais Clássicos

Um bilhar poligonal de h lados consiste de uma única partícula confinada em uma região poligonal plana, movendo-se com velocidade constante até ela colidir elasticamente em um dos seus lados. Como a colisão é perfeitamente elástica, a reflexão é especular, de maneira que a velocidade refletida \mathbf{v}' em função da velocidade incidente \mathbf{v} é

$$\mathbf{v}' = \mathbf{v} - 2(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}, \quad (2.1)$$

em que \mathbf{n} é o vetor unitário perpendicular em relação ao lado de incidência da partícula. A reflexão especular, sendo uma consequência da conservação da energia, preserva o volume do espaço de fase; isso não ocorre mais se a reflexão não for mais especular em nenhum sistema de coordenadas³, levando o bilhar poligonal a exibir uma dinâmica hiperbólica [89].

Uma vez garantido que a energia é conservada, temos uma constante de movimento. Como bilhares poligonais não apresentam instabilidade exponencial em sua dinâmica, pode-se pensar que sempre serão integráveis, mas esse não é o caso. Recordemos, antes, a definição de integrabilidade, segundo Arnold-Liouville (veja o **Apêndice A** para detalhes sobre integrabilidade em sistemas clássicos).

Integrabilidade Clássica (Liouville-Arnold): Um sistema clássico dado por um hamiltoniano⁴ $\mathcal{H}(q, p)$, com f graus de liberdade, será integrável se houver f constantes de movimento $C_i(q, p)$ ⁵ tal que:

³Essa ressalva é importante, pois o espaço de configuração do sistema de duas partículas clássicas na caixa 1D pode ser interpretado como um bilhar triângulo retângulo isósceles nas coordenadas q_1 e q_2 das partículas na caixa 1D. Nessas coordenadas, a reflexão especular na hipotenusa ocorre apenas para massas iguais, sendo necessário uma mudança conveniente de coordenadas para recuperar a reflexão especular na hipotenusa para quaisquer massas (veja o **Apêndice D**).

⁴ $\mathcal{H}(q, p)$ é um funcional, ou seja, uma função que associa elementos de um espaço vetorial de funções a um corpo de escalares, usualmente de números reais. Como funcional é um substantivo masculino, nos referimos a $\mathcal{H}(q, p)$ como hamiltoniano. Essa nomenclatura é preferida aqui por se manter a mesma nas referências a sua versão quântica de operador, um substantivo masculino: o operador hamiltoniano. Outros autores pressupõe o termo “função”, um substantivo feminino para $\mathcal{H}(q, p)$, justificando o uso do termo hamiltoniana [94].

⁵Conforme [95], está implícito que as constantes de movimento de $C_i(q, p)$ devem ser univocadas, ou unívocas, para se garantir a integrabilidade do sistema.

1. para todo $0 < i \leq f$, $\{C_i(q, p), \mathcal{H}(q, p)\} = 0$, em que $\{, \}$ são os parênteses de Poisson;
2. para todo $0 < i \leq f$, $0 < j \leq f$, $i \neq j$, $\{C_i(q, p), C_j(q, p)\} = 0$, ou seja, as constantes de movimento estão em **involução**;
3. para todo $0 < i \leq f$, $\nabla C_i(q, p)$ são linearmente independentes.

Como consequência, as órbitas do sistema permanecerão confinadas em um toro [94]. Toro é um espaço topológico gerado pelo produto cartesiano finito de circunferências. Em particular, no caso de duas circunferências, o toro tem a aparência de uma câmara de pneu.

Um conceito topológico importante em sistemas dinâmicos é o *genus*, ou gênero em português. O *genus* de uma superfície é o número máximo de cortes ao longo de uma curva fechada simples, sem intersecção, que não divide a superfície [96, 97]. Intuitivamente, o *genus* é o número de “buracos” dessa superfície⁶. Assim, como a esfera não tem “buraco”, seu *genus* é zero; o toro tem um “buraco”, então o seu *genus* é igual a um; um bitoro ou 2-toro (dois toros colados) tem dois “buracos”, então o seu *genus* é dois, etc.

Para o caso particular de bilhares poligonais, o *genus* é determinado pela natureza dos seus ângulos internos, conforme a seguinte classificação:

- *Bilhares irracionais*: possuem, ao menos, um ângulo interno que não é múltiplo racional de π , ou seja $\theta_j \neq \frac{m_j \pi}{n_j}$. Nesse caso, há apenas uma constante de movimento, a energia total do sistema, e as órbitas não estão limitadas topologicamente a um toro. Ferrán Valdez demonstrou que bilhares poligonais irracionais tem *genus* infinito, com uma superfície invariante constituído por infinitos toros [98], como pode-se observar na Fig. 2.2 (devido a sua aparência, essa superfície recebeu o nome de “Monstro do Lago Ness”).
- *Bilhares racionais*: todos os seus ângulos internos são múltiplos racionais de π , ou seja $\theta_j = \frac{m_j \pi}{n_j}$ (m_j e n_j são inteiros positivos coprimos⁷); nesse caso, há apenas duas constantes de movimento: a energia total do sistema e a quantidade $C(x, y, p_x, p_y)$, que depende do ângulo de incidência nos lados do polígono [93, 99, 100]. No entanto,

⁶Essa ideia de buracos em uma superfície para o *genus* é restrito a superfícies orientáveis, que são aquelas que preservam a orientação de um dado vetor sobre a superfície em uma volta completa. A esfera e o toro é um exemplo de superfície orientável, enquanto que a faixa de Möbius e a garrafa de Klein são superfícies não orientáveis.

⁷Coprimos são números inteiros primos entre si.

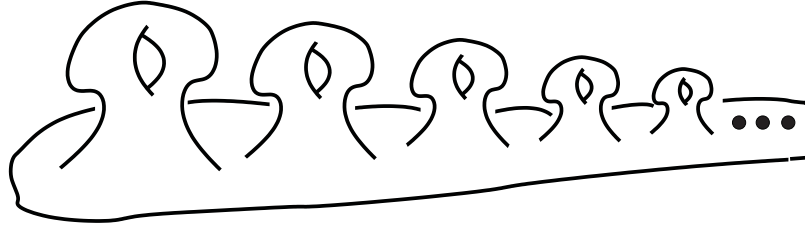


Figura 2.2: “Monstro do Lago Ness”: superfície invariante para bilhares poligonais irracionais.

isso ainda não conduz à integrabilidade, pois os parênteses de Poisson entre o hamiltoniano e essa constante de movimento são nulos apenas quando $m_j = 1$. Para $m_j > 1$, a constante de movimento exhibe singularidades nos vértices, gerando pontos de sela na superfície topologicamente invariante [93, 101], e o *genus* mantém um valor finito maior que um. Tais bilhares são definidos como pseudointegráveis [68, 93], pois ainda preservam a regularidade dinâmica de um bilhar integrável⁸. O valor do *genus* pode ser calculado para cada bilhar em função dos seus ângulos internos por meio do Método de Desdobramento de Superfícies, ou *unfolding*, a ser explicado na próxima subseção (o *unfolding* também é denominado de Construção de Zemlyakov-Katok [102, 103]).

Assim, as características geométricas dos bilhares poligonais permitem inferir a respeito da integrabilidade do sistema, sem apelo direto às equações de movimento.

2.1.2 O Método *Unfolding*

O *unfolding* é um método topológico para gerar superfícies topologicamente invariantes, permitindo, assim, o cálculo do *genus* correspondente. No caso de bilhares racionais, as sucessivas colisões da partícula com as paredes geram um número finito de direções possíveis, pois o número de reflexões também é finito, e cada colisão é uma reflexão por um certo ângulo, como mostra a Eq. (2.1). Então, podemos interpretar a colisão como a geração de um elemento do Grupo Diedral (veja **Apêndice B**). Esse grupo tem $2\mathcal{N}$ elementos, em que \mathcal{N} é o mínimo múltiplo comum dos denominadores dos ângulos internos do bilhar poligonal. Assim, a superfície invariante é formada pela sucessão de reflexões do bilhar poligonal em vez da trajetória da partícula, de tal maneira a se ter um polígono regular inscrito. Esse polígono define uma superfície topologicamente invariante \mathcal{S} , com seus lados opostos identificados como sendo os mesmos. Essa identificação, então, permite

⁸Há também os bilhares quase-integráveis, que são bilhares racionais, cujos lados são comensuráveis [93].

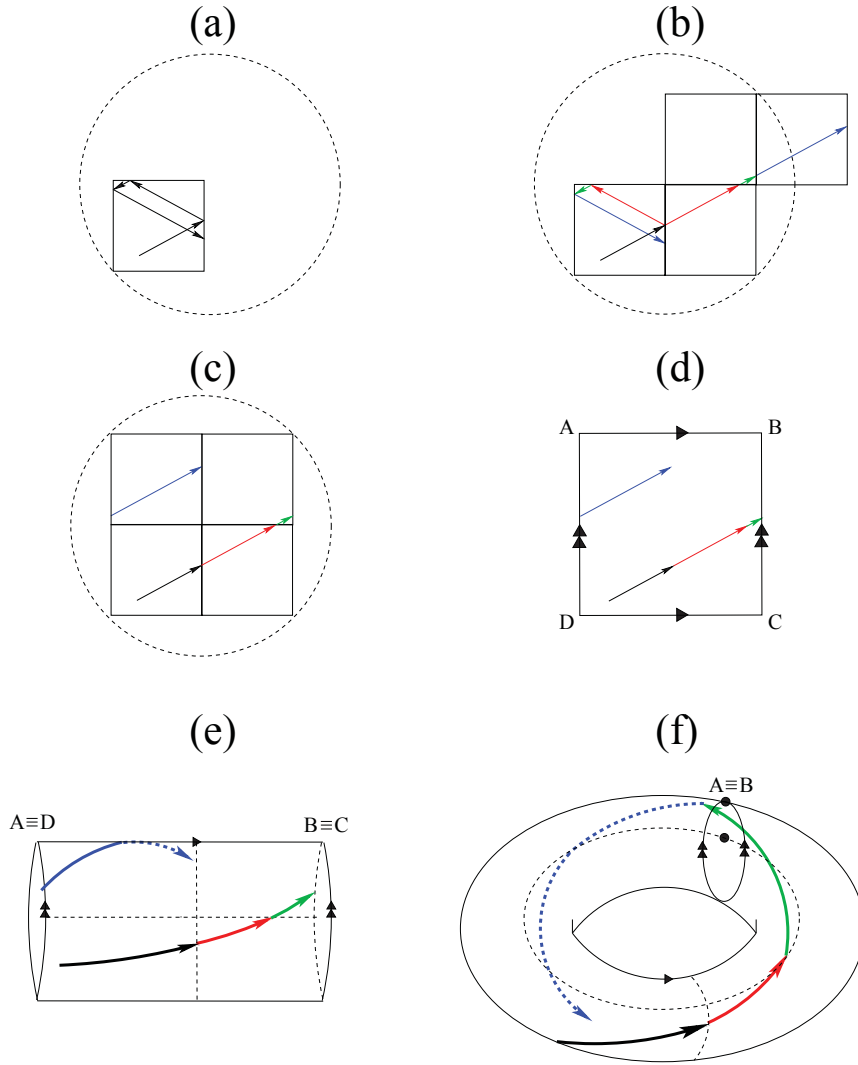


Figura 2.3: *Unfolding* para um bilhar quadrado. A presença da circunferência pontilhada é apenas para se ter uma referência visual. (a) Bilhar quadrado mostrando quatro colisões com as paredes do bilhar. (b) Representação do desdobramento das cópias do quadrado. Note na terceira colisão que a cópia do quadrado sai da inscrição da circunferência. (c) O quadrado, então, é transladado a fim de se manter inscrito na circunferência. (d) A superfície invariante resultante é um quadrado maior, na qual os pares de lados \overline{AB} e \overline{DC} são identificados, assim como os pares de lados \overline{AD} e \overline{BC} . Logo, topologicamente, essa superfície invariante é a representação plana de um toro. (e) A união dos pontos D em A e C em B gera uma superfície cilíndrica; (f) e a união do ponto A em B forma o toro.

a colagem desses lados, formando uma superfície com um certo número de buracos.

A Fig. 2.3 ilustra o *unfolding* para um bilhar quadrado. Nesse caso particular, coincidentemente, a superfície \mathcal{S} é também um quadrado, com lados paralelos idênticos. Colando-se esses lados, obtemos um toro [104]. Consequentemente, a dinâmica gerada por esse bilhar é integrável. Note na Fig. 2.3(d) que os lados paralelos têm setas para indicar que possuem a mesma orientação⁹, que devem ser mantidas na construção do toro

⁹Caso os lados, ou segmentos de reta, \overline{AD} e \overline{BC} fossem de orientação contrária, essa superfície não

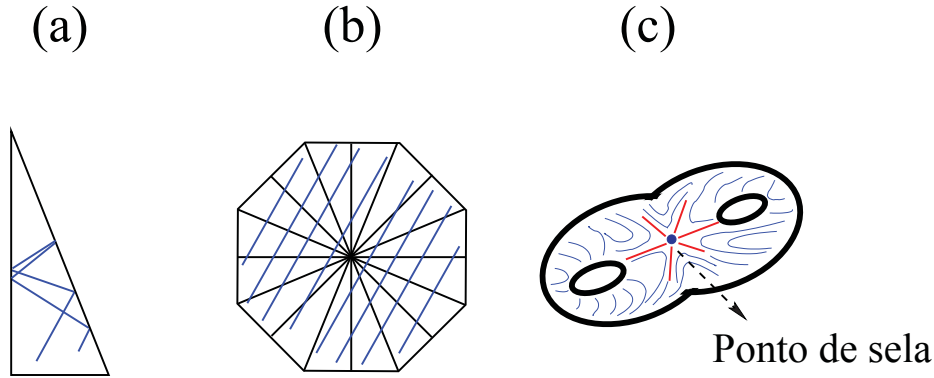


Figura 2.4: (a) *Unfolding* para um bilhar triângulo retângulo com ângulos $\frac{\pi}{8}$ e $\frac{3\pi}{8}$. (b) A superfície invariante \mathcal{S} é um octógono contendo algumas trajetórias clássicas. (c) O bitoro, correspondente ao octógono, apresenta um ponto de sela entre os dois toros, gerando instabilidade nas trajetórias e, conseqüentemente, levando à pseudointegrabilidade característica de bilhares racionais com $g(\mathcal{S}) > 1$.

(veja as Figs. 2.3(e) e (f)).

Já a Fig. 2.4 ilustra o *unfolding* para um bilhar triângulo retângulo com ângulos internos $\frac{\pi}{8}$ e $\frac{3\pi}{8}$, que gera um bitoro. Nesse caso, aparece um ponto de sela na região de união dos dois toros, Fig. 2.4(c), uma região de instabilidade das trajetórias clássicas, na qual podem passar de um toro para o outro. A Fig. 2.5 mostra a correspondência da representação plana da superfície invariante (octógono) e o bitoro, com a identificação dos lados opostos (veja a Fig. 2.5(a)); os vértices originam singularidades cônicas (veja as Figs. 2.5(b) e (f)), de tal maneira que, em suas vizinhanças, a superfície de Riemann é da forma $f(\mathcal{Z}) = \mathcal{Z}^{\frac{1}{m_i}}$, em que \mathcal{Z} é uma variável complexa e m_i é o numerador dos ângulos internos do bilhar [93]. Como os lados opostos são idênticos, os vértices se unem, originando um único ponto, denominado ponto de sela (veja as Figs. 2.5(c) e (e)), que é a característica local das singularidades cônicas [105].

As singularidades cônicas estão associadas a um ângulo cônico múltiplo inteiro de 2π : $2\pi m_i$. Assim, no bilhar da Fig. 2.4(a), em que o único numerador maior que um é aquele igual a três, segue-se que o ângulo cônico é 6π . Agora, para triângulos retângulos com ângulos agudos iguais a $\frac{\pi}{4}$, $\frac{\pi}{4}$ (triângulo retângulo isósceles) e $\frac{\pi}{3}$, $\frac{\pi}{6}$ (triângulo hemiequilátero¹⁰), respectivamente, todos os numeradores são iguais a um; então, o ângulo cônico é 2π , as singularidades representadas pelos vértices são removíveis [106] e, por isso, não há ponto de sela, indicando que esses bilhares devem ser integráveis. De fato, aplicando o *unfolding* para o bilhar triângulo retângulo isósceles, a superfície invariante \mathcal{S} é um quadrado, semelhante ao da Fig. 2.3, que é topologicamente equivalente a um toro e,

seria mais um toro, mas sim uma garrafa de Klein [104].

¹⁰A denominação hemiequilátero se refere ao fato de ser a metade de um triângulo equilátero.

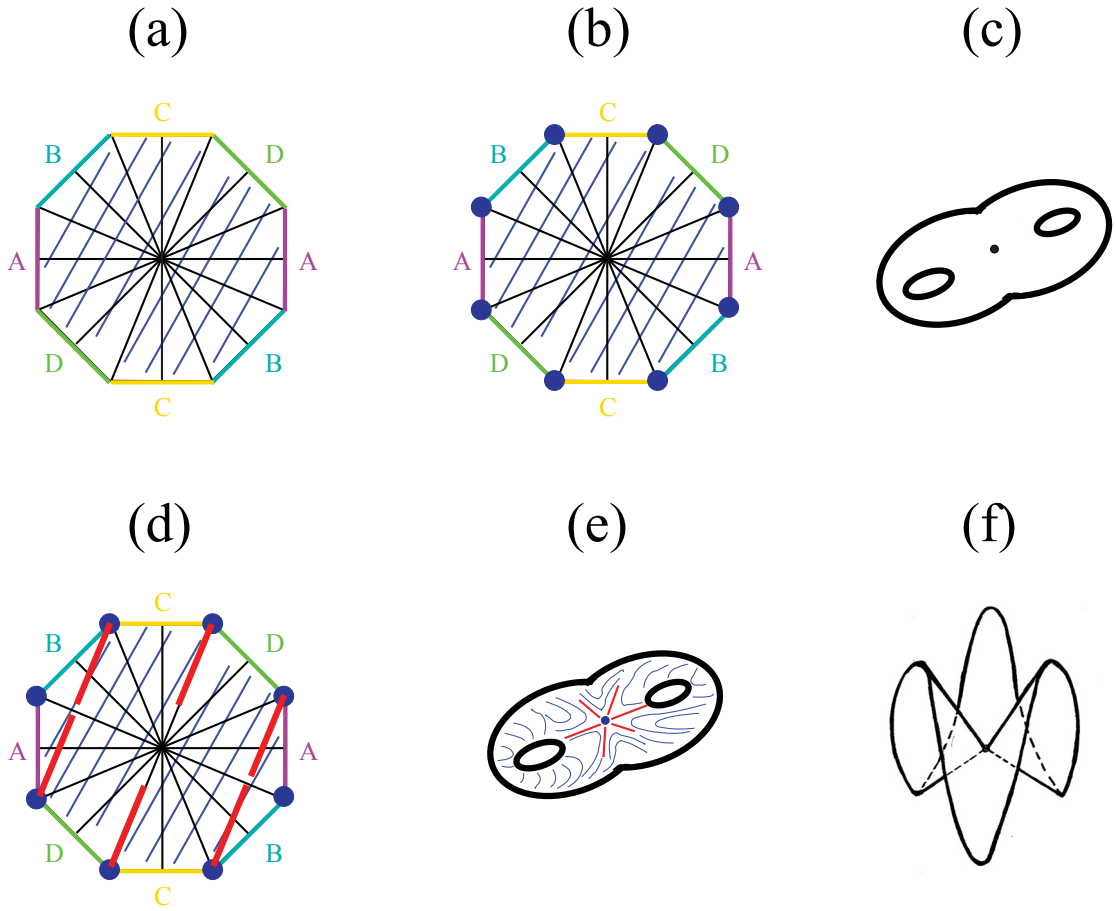


Figura 2.5: (a) Superfície invariante para o bilhar triângulo retângulo com ângulos $\frac{\pi}{8}$ e $\frac{3\pi}{8}$, identificando-se com uma mesma cor e letra os lados a serem colados. (b) Os pontos nos vértices representam as singularidades cônicas da superfície invariante. (c) Como consequência da identificação dos lados opostos do octógono, os seis vértices correspondem a um único ponto no bitoro: o ponto de sela. (d) Separatrizes, em vermelho, representadas na superfície invariante. (e) Separatrizes, em vermelho, representadas no bitoro. (f) Representação do ângulo cônico de 6π associado ao octógono (consulte [105] para uma ilustração alternativa).

portanto, é integrável. O *unfolding* aplicado ao bilhar triângulo hemiequilátero gera uma superfície \mathcal{S} hexagonal, que também é a representação plana de um toro, como ilustrado na Fig. 2.6.

Pode-se interpretar essa situação também pela perspectiva da superfície de Riemann $f(\mathcal{Z}) = \mathcal{Z}^{\frac{1}{m_i}}$, que é uma função complexa plurívoca, ou multivalorada, para todo inteiro $m_i > 1$. Esse inteiro representa o número de ramificações da solução de $f(\mathcal{Z})$ e, a cada uma delas, está associado um plano, ou uma superfície menor, denominada de folha [107, 108] (a Fig. 2.7 mostra dois casos particulares). O ponto de ramificação é em $\mathcal{Z} = 0$. Assim, para o bilhar da Fig. 2.4(a), vimos que $m_i = 3$, o que significa que a superfície de Riemann $f(\mathcal{Z}) = \mathcal{Z}^{\frac{1}{3}}$ tem três folhas (veja a Fig. 2.7(b)), cada qual correspondendo a uma possível direção que a trajetória clássica pode ter no bitoro na vizinhança do ponto de sela. Para

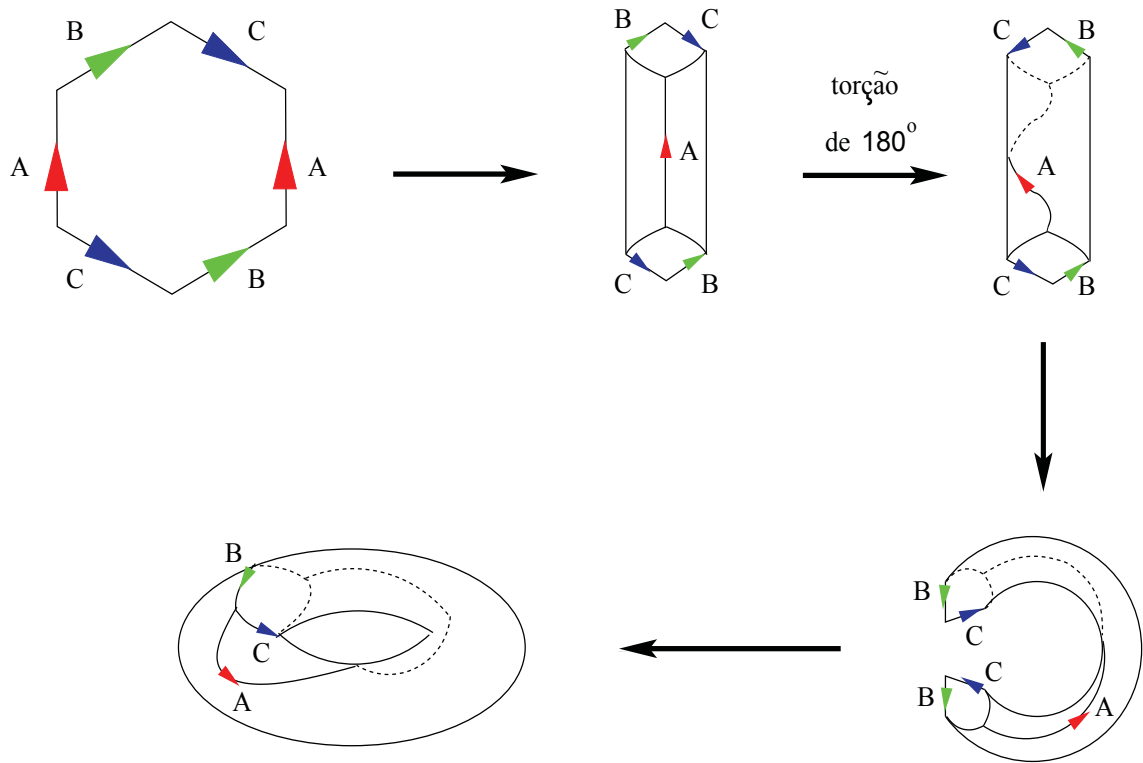


Figura 2.6: Descrição da construção de um toro a partir de um hexágono: os lados opostos do hexágono são identificados como sendo os mesmos. Assim, os lados A são colados formando um cilindro; como os lados B e C estão diametralmente opostos, não é possível colá-los. Para que isso seja possível, aplica-se uma torção de 180° no cilindro para termos, enfim, um toro.

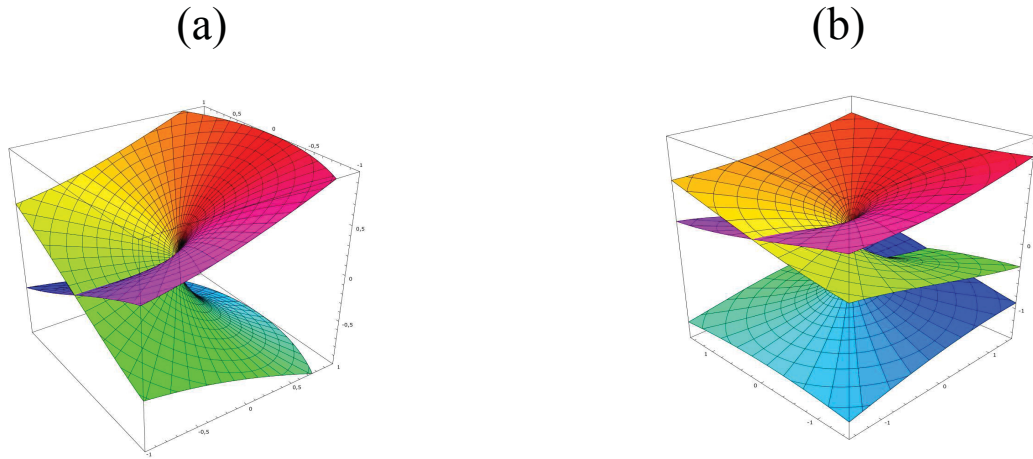


Figura 2.7: Representação das superfícies de Riemann com ponto de ramificação em $\mathcal{Z} = 0$ para (a) $f(\mathcal{Z}) = \mathcal{Z}^{\frac{1}{2}}$ com duas folhas e (b) $f(\mathcal{Z}) = \mathcal{Z}^{\frac{1}{3}}$ com três folhas (as duas figuras foram copiadas de https://en.wikipedia.org/wiki/Riemman_surface sob a licença de *Creative Commons Attribution-Share Alike 3.0 Unported* e autoria de Leonid 2).

os dois bilhares triângulo retângulo integráveis, há apenas uma única folha, pois $m_1 = 1$, e a superfície de Riemann é $f(\mathcal{Z}) = \mathcal{Z}$.

A não integrabilidade em bilhares poligonais clássicos para numeradores de ângulos in-

ternos $m_i > 1$, seja pelas singularidades cônicas, seja pela existência de folhas da superfície de Riemann, repercute também na não integrabilidade no análogo quântico desses bilhares pela observação de espalhamento difrativo nas proximidades dos vértices [109](veja a Seção 2.1.4).

O método *unfolding* permite obter analiticamente uma equação para o cálculo do *genus* $g(\mathcal{S})$ de uma superfície invariante \mathcal{S} poligonal em função dos seus ângulos internos, em vez de seguir o procedimento descrito anteriormente para cada bilhar poligonal racional a ser analisado.

O *genus* de uma superfície orientável depende do número de faces F , de arestas (lados) E e de vértices V , segundo a equação característica de Euler χ [97],

$$\chi = 2 - 2g(\mathcal{S}), \quad \chi = F - E + V. \quad (2.2)$$

Então, o *genus* em função de F , E e V fica

$$g(\mathcal{S}) = 1 + \frac{1}{2}(-F + E - V). \quad (2.3)$$

Sendo \mathcal{S} formada por reflexões de um polígono de h lados, com ângulos internos racionais irreduzíveis $\frac{m_j \pi}{n_j}$ ($1 \leq j \leq h$) e $\mathcal{N} = \text{mmc}(n_1, \dots, n_h)$ ¹¹, decorre do *unfolding* [101, 106] que $F = 2\mathcal{N}$, $E = \mathcal{N}h$ e $V = \mathcal{N} \sum_{j=1}^h \frac{1}{n_j}$ (veja o **Apêndice C** para o cálculo do *genus* para alguns bilhares citados aqui). Logo,

$$g(\mathcal{S}) = 1 + \frac{\mathcal{N}}{2} \left(h - 2 - \sum_{j=1}^h \frac{1}{n_j} \right).$$

Mas, lembrando que a soma dos ângulos internos de um h -polígono $S_h = (h-2)\pi$, em que $S_h = \sum_{j=1}^h \frac{m_j}{n_j} \pi$, obtemos

$$g(\mathcal{S}) = 1 + \frac{\mathcal{N}}{2} \sum_{j=1}^h \frac{m_j - 1}{n_j}. \quad (2.4)$$

A Eq. (2.4) mostra claramente que $g(\mathcal{S}) = 1$ apenas para polígonos com ângulos internos $\theta_j = \frac{\pi}{n_j}$, que são o triângulo equilátero (ângulos $\frac{\pi}{3}$, $\frac{\pi}{3}$, $\frac{\pi}{3}$), triângulo retângulo isósceles, triângulo hemiequilátero e o retângulo. Isso significa que a maioria dos bilhares poligonais não são integráveis.

A Eq. (2.4) pode ser simplificada para bilhares triângulo retângulo, conforme será mostrado no Capítulo 5.

¹¹ $\text{mmc}(n_1, \dots, n_h)$: mínimo múltiplo comum de n_1, \dots, n_h .

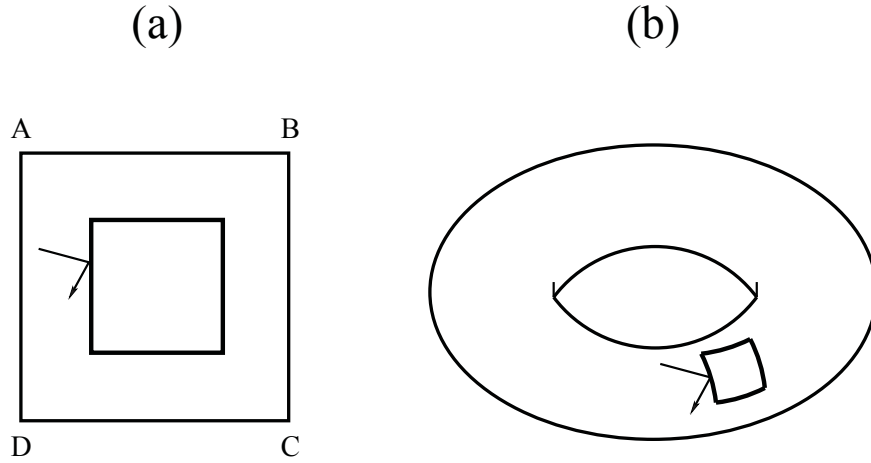


Figura 2.8: (a) Bilhar quadrado com condições de contorno periódico contendo um quadrado menor concêntrico. (b) A identificação dos lados opostos origina um toro com uma barreira quadrada em sua superfície. A linha orientada representa uma trajetória de uma partícula refletida pela barreira. Esse sistema é um bilhar pseudointegrável, pois seu *genus* é igual a 5.

2.1.3 Bilhares Poligonais com Barreiras

Podemos construir bilhares poligonais pseudointegráveis a partir de bilhares integráveis pelo acréscimo de uma barreira em seu interior. Um sistema bem simples para entender a transição de integrabilidade para a pseudointegrabilidade é o bilhar quadrado. Como explicado na seção 2.1.2, a aplicação do *unfolding* gera uma superfície invariante que também é um quadrado, mas agora, periódico. Essa é a representação plana de um toro (veja a Fig. 2.3). Equivalentemente, podemos interpretar essa superfície invariante como sendo um bilhar quadrado periódico. Em qualquer caso, o *genus* é igual a um e a dinâmica clássica do sistema fica restrita a um único toro.

P. J. Richens e M. V. Berry modificaram o bilhar quadrado periódico, incluindo em seu interior um quadrado menor e concêntrico [68], assemelhando-se ao bilhar de Sinai, como se vê na Fig. 2.8(a). Como esse bilhar permanece periódico, a identificação dos seus lados opostos ainda gera um toro, mas com uma barreira quadrada em seu interior (veja a Fig. 2.8(b)). Os vértices da barreira quadrada introduzem singularidades ao sistema, de maneira que o quadrado do momento vetorial, que é uma constante de movimento longe dessas singularidades, passa a ser singular aí; desse modo, o campo vetorial decorrente dessas constantes de movimento [110] precisa ser determinado nas vizinhanças dos vértices. Richens e Berry conseguiram determinar a topologia dessas singularidades (as folheações de uma superfície Riemann), de maneira a entender o comportamento do campo vetorial lá e, conseqüentemente, calcular o *genus* desse sistema como sendo igual a 5 [68]. Esse resultado pode ser obtido também pela Eq. (2.4), notando que os ângulos desse bilhar

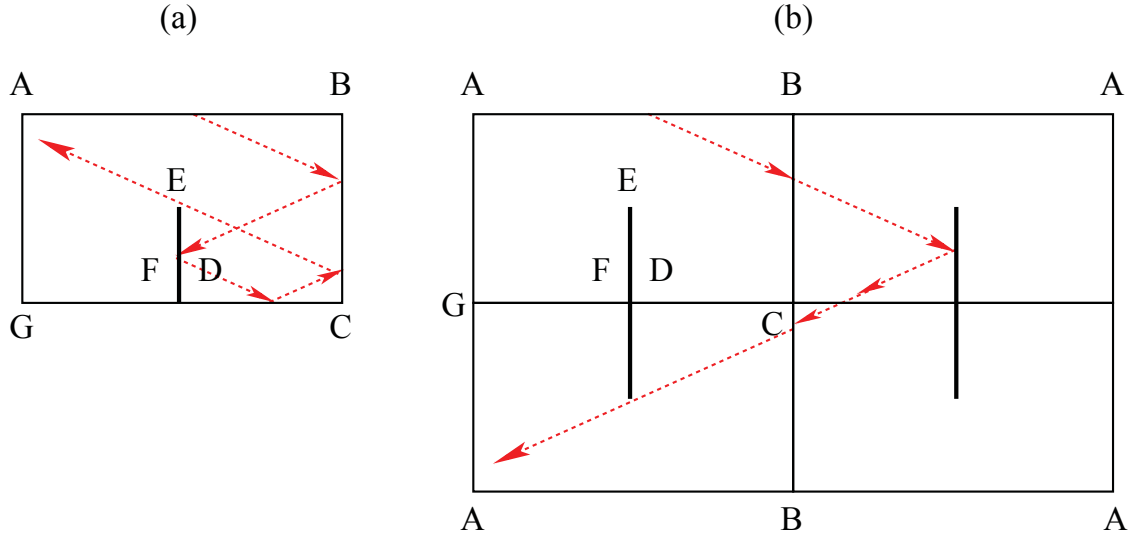


Figura 2.9: (a) Bilhar retangular com um segmento de reta como barreira. As setas indicam a trajetória refletida por uma partícula quando ela incide nas paredes e na barreira. (b) Por *unfolding*, a superfície invariante é um retângulo com dois segmentos internos como barreiras, o que não acontece nas superfícies invariantes dos bilhares sem barreiras.

são aqueles externos da barreira quadrada, isto é, todos iguais a $\frac{3\pi}{2}$.

Outra modificação em um bilhar quadrado, ou retangular, que o torna pseudointegrável, é a inserção de um segmento de reta como uma barreira rígida, como mostra a Fig. 2.9(a). Para calcular o *genus*, precisamos perceber que o retângulo com barreira é um heptágono, pois é formado pelos segmentos \overline{AB} , \overline{BC} , \overline{CD} , \overline{DE} , \overline{EF} , \overline{FG} e \overline{GA} . O ângulo no vértice em E é 2π e os demais são retos; logo, a Eq. (2.4) nos dá um *genus* igual a 2 para esse bilhar, ou seja, a dinâmica clássica do sistema está confinada em um bitoro e a Fig. 2.9(b) é a sua representação planar, na qual a partícula permanece em um dos toros enquanto ela for refletida pela barreira. O bitoro também pode ser representado por uma superfície filamentada da Fig. 2.10(a) sob condições de contorno periódicas [111, 112], uma forma alternativa para descrever a dinâmica de transição entre toros, Fig. 2.10(b). Esse bilhar tem o mesmo comportamento dinâmico dos bilhares das Figs. 2.10(c) e (d) que possuem a barreira de segmento deslocado. Uma maneira alternativa para perceber essa equivalência é notar que se estendêssemos a superfície invariante da Fig. 2.9(b) para todo o espaço, ela será semelhante à superfície da Fig. 2.10(e).

2.1.4 Bilhares Poligonais Quânticos

A descrição quântica de bilhares permite compreender a relação entre sistemas quânticos e seus análogos clássicos a respeito da integrabilidade. Esse interesse remonta ao início do desenvolvimento da teoria quântica. A questão importante se refere à identificação de

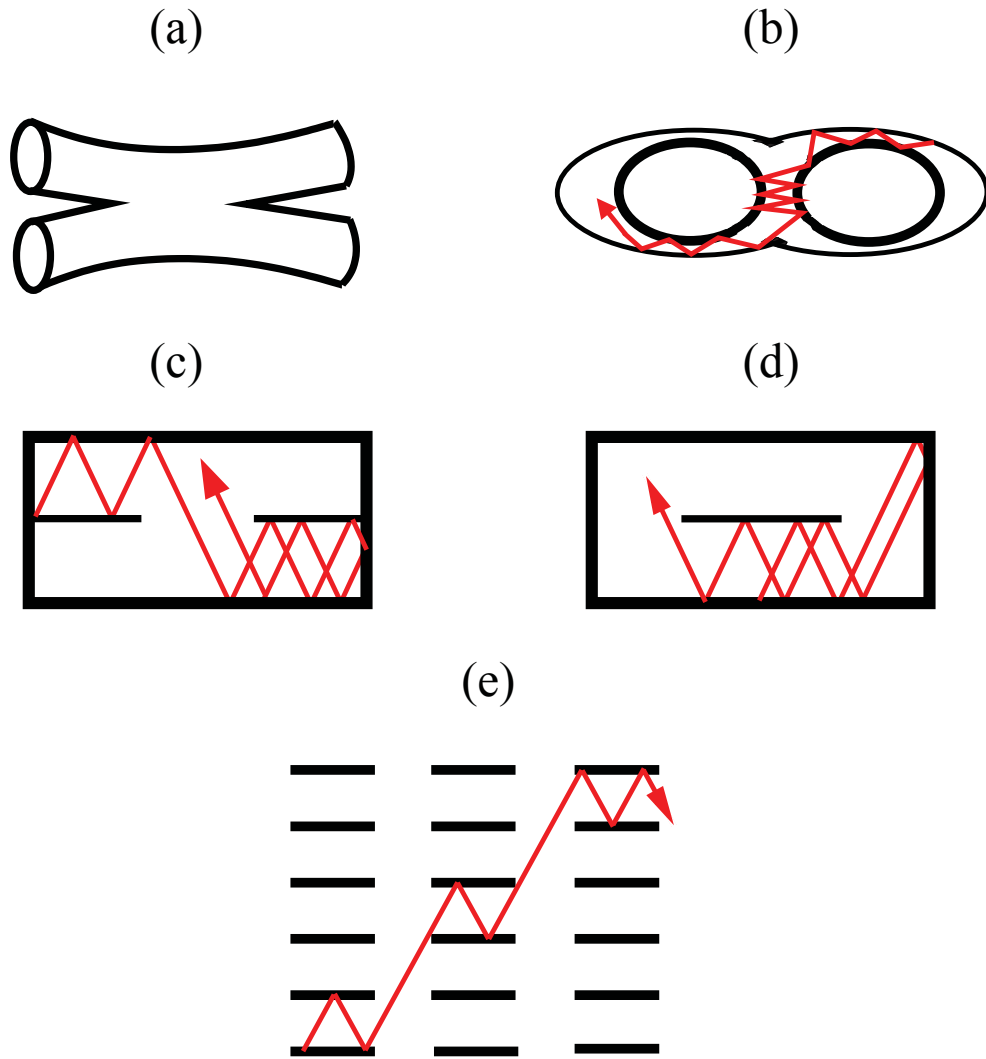


Figura 2.10: (a) Superfície filamentada sob condições de contorno periódica representando um bitoro. (b) Um bitoro representando um bilhar contendo uma barreira de segmento. (c) Bilhar com duas barreiras de segmento. Perceba a semelhança entre a representação desse bilhar, se incluíssemos condições de contorno periódicas, com a superfície filamentada, na qual o espaço vazio de transição de um filamento ao outro corresponde ao espaço vazio no bilhar no qual a trajetória passa da região inferior para a superior. (d) Bilhar com uma barreira de segmento, que é equivalente ao do item (c), contanto que o comprimento das barreiras sejam as mesmas. (e) Estendendo-se esses bilhares para todo o espaço, obtemos uma sequência periódica de barreiras de segmentos [112].

integrabilidade/caos de sistemas clássicos nos sistemas quânticos análogos. Há uma diferença fundamental quanto a isso: enquanto na Mecânica Clássica, um sistema caótico é caracterizado por uma instabilidade exponencial na evolução de trajetórias originárias de condições iniciais muito próximas, no âmbito quântico, isso não é possível, pois trajetórias não são definidas¹² e a descrição quântica baseia-se na evolução temporal unitária de estados quânticos. Isso significa que dois estados quânticos diferindo-se por uma pequena

¹²Restringimo-nos aqui às teorias quânticas usuais de Schrödinger e Heisenberg.

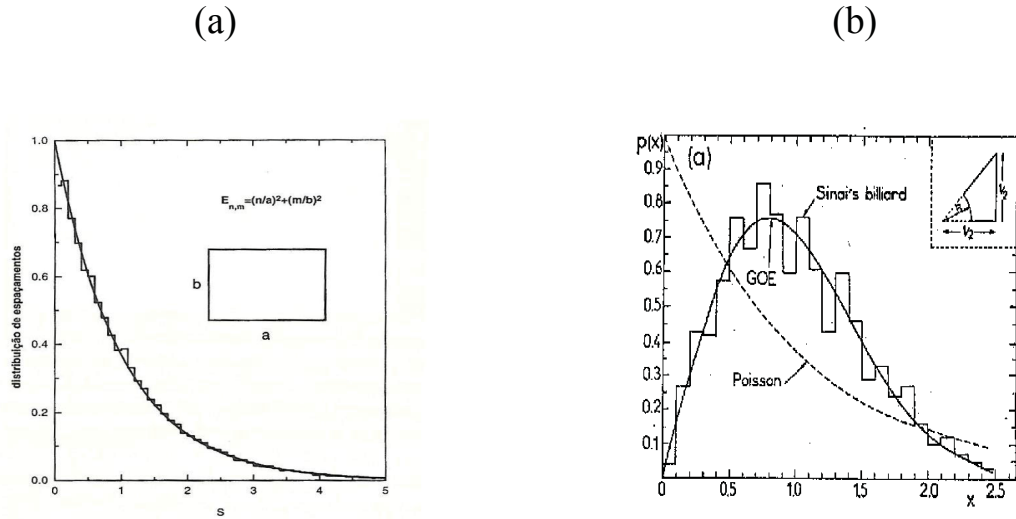


Figura 2.11: (a) Bilhar retangular (integrável): Distribuição de Poisson (figura extraída de [113]); (b) Bilhar de Sinai (não integrável): Distribuição GOE (figura extraída de [114]).

quantidade, tem preservada essa diferença no decorrer da sua evolução temporal [113].

Essa relação de integrabilidade/caos foi “resolvida” através da Conjectura de Bohigas-Giannoni-Schmit em 1984 [114], propondo, como critério universal, dois perfis estatísticos característicos de sistemas integráveis e caóticos, dado pela probabilidade $P(s)$ de encontrar dois níveis de energia com espaçamento s entre eles:

Distribuição Estatística de Poisson: $P(s) = e^{-s}$. O sistema quântico é integrável, cujo análogo clássico é integrável, mostrando que os níveis de energia vizinhos não são correlacionados. Esse é o caso, com algumas ressalvas [115–117], do bilhar retangular (veja a Fig. 2.11(a)).

Distribuição Estatística GOE (Gaussian Orthogonal Ensemble): $P(s) = \frac{\pi s}{2} e^{-\frac{\pi s^2}{4}}$. O sistema quântico é caótico, cujo análogo clássico é caótico. Esse é o caso do bilhar de Sinai (veja a Fig. 2.11(b)). Essa distribuição mostra que os níveis de energia repelem-se entre si, pois os autoestados do sistema se devem à superposição de muitos estados não perturbados que interagem entre si.

A distribuição GOE foi proposta primeiramente por Eugene P. Wigner em 1956 para se entender o crescimento exponencial da densidade de níveis de energia de excitação para núcleos atômicos compostos. Apenas mais tarde se percebeu a sua relação com a não integrabilidade de sistemas quânticos. Além disso, GOE aplica-se apenas para hamiltonianos invariantes sob reversão temporal. Na ausência dessa simetria, usa-se a função distribuição GUE (Gaussian Unitary Ensemble) e na ausência de simetria rotacional, mas com simetria de reversão temporal, usa-se o GSE (Gaussian Symplectic Ensemble) [118].

Embora não haja uma prova analítica, a Conjectura de Bohigas-Giannoni-Schmit

tem sido verificada numericamente para muitos sistemas físicos, estabelecendo-se como um método confiável para sistemas quânticos típicos. Acredita-se que ela se mantenha válida com a elevação dos níveis de energia a fim de preservar a consistência com o limite clássico (esse é um problema em aberto ainda).

Uma (possível) exceção à Conjectura de Bohigas-Giannoni-Schmit é o caso do bilhar de Sinai quando o raio da sua circunferência interna se aproxima de zero, de maneira que o espalhador se torne pontual. Classicamente, o sistema não é caótico, pois as trajetórias que são afetadas pelo espalhador pontual são irrelevantes (constituem um conjunto de medida nula); no entanto, por conta do Princípio da Incerteza de Heisenberg, quanticamente o espalhador pontual influencia os autoestados de forma que o espectro de energia passa a ser GOE, ou seja, o sistema quântico é caótico. Tais sistemas quânticos caóticos com análogo clássico não caótico manifestam a propriedade denominada “caos ondulatório” [119–122].

Bilhares poligonais pseudointegráveis caracterizam-se por apresentarem uma distribuição espectral intermediária entre Poisson e GOE, uma distribuição semipoisson (semi-Poisson em inglês),

$$P_{\text{SP}}(s) = 4se^{-2s}, \quad (2.5)$$

com um aumento linear nos espaçamentos de níveis de energia pequenos (GOE) e uma queda exponencial nos espaçamentos grandes (Poisson) [68, 123], como encontrada em sistemas desordenados em transições metal-isolante [124, 125]. Além disso, apesar das autofunções serem irregulares, o que não acontece nos casos integráveis, elas se distribuem no espaço de maneira praticamente uniforme [126].

Os bilhares poligonais quanticamente integráveis são aqueles cujo análogo clássico é integrável e, como já vimos anteriormente, há apenas quatro (o retângulo, o triângulo equilátero, o triângulo retângulo isósceles e o triângulo hemiequilátero) e possuem soluções exatas conhecidas. G. B. Shaw investigou o bilhar quadrado (caso particular de um retângulo), um problema separável nas coordenadas x e y , obtendo duas soluções além daquelas esperadas pelo grupo de simetria do polígono [127]. Ele o fez estendendo o domínio para os números complexos e incluindo uma estrutura de anel¹³. Wai-Kee Li também explorou as degenerescências nesse bilhar via Teoria dos Números [130], além de obter as soluções para os problemas não separáveis do bilhar triângulo retângulo isósceles [131], a partir da solução do quadrado, e do bilhar triângulo equilátero, pela identificação de todos os seus grupos de simetria [132], algo que ainda não havia sido realizado. Wajdi A.

¹³Anel é um conjunto munido de duas operações binárias, adição e multiplicação. Quanto à adição, esse conjunto é um grupo comutativo. Quanto à multiplicação, esse conjunto é associativo, possui elemento neutro multiplicativo e é distributivo em relação à adição [128, 129].

Gaddah generalizou essas soluções aplicando Grupos de Lie [133]. A solução para o bilhar triângulo hemiequilátero é obtida pela quantização EBK (Einstein-Brillouin-Keller) [134], mas obtemos também a mesma solução como resultado limite da nossa proposta de *Ansatz* de Bethe.

Apesar de já termos comentado na Introdução desta tese sobre conceitos gerais de integrabilidade quântica [7–9], no presente contexto estamos discutindo integrabilidade (no sentido de regularidade) em estreita associação com a dicotomia clássica-quântica. Portanto, de forma não tão geral, mas suficiente para certos propósitos, alguns autores se referem à integrabilidade no âmbito quântico (ou integrabilidade quântica) através dos conceitos apresentados acima. Por outro lado, os mesmos são baseados em um critério estatístico de distribuição de níveis de energia próximos, pressupondo que integrabilidade ou não integrabilidade seja preservada na transição clássica-quântica e seja, também, uma caracterização precisa o suficiente para ser usada como uma definição. No entanto, como vimos anteriormente, sistemas físicos contendo alguma singularidade, apresentam “caos ondulatório”. Além disso, há sistemas integráveis que não obedecem rigorosamente a distribuição de Poisson. Este é o caso, por exemplo, de sistemas conservativos de um grau de liberdade, como o oscilador harmônico simples [135], no qual há um tipo de repulsão dos níveis de energia próximos, devido aos espaçamentos serem iguais à frequência do movimento clássico [115]. Outro exemplo simples é o bilhar retangular: como a distribuição Poisson denota aleatoriedade, é preciso que haja **incomensurabilidade entre os níveis de energia**, que é conseguido se os lados desse bilhar forem incomensuráveis, ou seja,

$$E_{uv} = \mathfrak{c}u^2 + v^2, \quad (2.6)$$

com \mathfrak{c} uma constante irracional e u e v os números quânticos. Giulio Casati [115], com uma análise estatística minuciosa, observou que a distribuição dos níveis de energia para espaçamentos pequenos apresenta flutuações significativas que afastam do perfil esperado, embora o aspecto geral dessa distribuição se assemelhe a de Poisson.

Em vista disso, seria interessante uma definição para a integrabilidade quântica mais precisa. Uma possibilidade seria adaptar a definição de integrabilidade de Liouville-Arnold via prescrição de Dirac, substituindo os parênteses de Poisson por comutadores e as funções por operadores. De acordo com Jarmo Hietarinta [136], esse procedimento aplica-se facilmente para operadores comutantes entre si, pois a equação de Schrödinger do sistema pode ser resolvida por quadraturas¹⁴. No caso de operadores quânticos não comutantes, uma solução possível é a obtenção de uma quantidade de operadores quânticos associa-

¹⁴Resolver por quadraturas significa expressar as soluções por integrais de funções conhecidas [94].

dos às constantes de movimento maior que o número de graus de liberdade do sistema. Dessa forma, os operadores não são mais funcionalmente independentes, mas isso permite a recuperação da comutatividade dos operadores quânticos e a solução da equação de Schrödinger por quadraturas. Entretanto, esse método de solução funciona apenas para potenciais de interação específicos. Stefan Weigert também usou a versão quântica adaptada da definição de integrabilidade clássica de Liouville-Arnold, mas excluindo a condição 3 correspondente à independência linear das constantes de movimento, por carecer de uma definição satisfatória para operadores [95]:

Integrabilidade Quântica (versão adaptada da definição de Liouville-Arnold):

um sistema quântico dado por um operador hamiltoniano H será integrável se houver f constantes quânticas de movimento C_i tal que:

1. para todo $0 < i \leq f$, $[C_i, H] = 0^{15}$, em que $[,]$ são os comutadores;
2. para todo $0 < i \leq f$, $0 < j \leq f$, $i \neq j$, $[C_i, C_j] = 0$.

S. Weigert mostrou que essa definição de integrabilidade quântica conduz a ambiguidades de classificação no seguinte sentido [95]:

- um sistema quântico análogo a um sistema clássico não integrável não implica que seja não integrável, pois é possível exibir constantes de movimento suficientes para satisfazer a definição de integrabilidade quântica acima;
- um sistema quântico análogo a um sistema clássico integrável não é necessariamente integrável, pois as constantes de movimento quânticas podem ser representadas como uma única quantidade conservada, ou seja, o sistema quântico é não integrável.

Além de não haver o correspondente quântico do item 3 a respeito da independência funcional das constantes de movimento, a ambiguidade de classificação também decorre do fato das condições 1 e 2 da definição de integrabilidade quântica serem satisfeitas para qualquer operador como constante de movimento, ao contrário do que acontece na definição clássica, na qual as constantes de movimento devem ser funções unívocas e suaves. É importante lembrar também que sistemas quânticos com *spin* não têm um análogo clássico. Isso mostra, então, que é necessária uma definição de integrabilidade genuinamente quântica. Bill Sutherland, quem também percebeu essa inadequabilidade, propôs a seguinte definição [24]:

Um sistema quântico é integrável se o espalhamento de uma partícula não for difrativo.

¹⁵ O denota o operador nulo.

Recordemos, por um momento, o que é difração. A Óptica Geométrica limita-se a fenômenos eletromagnéticos que obedecem ao princípio de propagação retilínea em meios isotrópicos e muda a sua direção conforme as leis de reflexão e refração, desde que o comprimento de onda seja desprezível em relação às dimensões de obstáculos ao seu redor. No entanto, quando o comprimento de onda não puder ser mais desprezado, a propagação da onda eletromagnética no encontro com algum obstáculo, sofrerá desvios não previstos pelos princípios básicos da Óptica Geométrica. Na prática, por exemplo, aparecerá luz e/ou sombra em regiões não previstas pela interpretação da luz como um feixe de raios [137]. Assim, no âmbito quântico, o espalhamento difrativo tem essa mesma conotação.

Esta proposta de definição para a integrabilidade quântica é motivada pelo seguinte problema de espalhamento: seja um sistema 1D de N partículas com massas iguais a m , sem *spin*, interagindo por um potencial de dois corpos $V(x_i - x_j)$ com hamiltoniano dado por [24]

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \sum_{1 \leq i < j}^N V(x_i - x_j) \mathbf{I}^{16},$$

em que $m = 1$ e a constante de Planck reduzida $\hbar = 1$, de tal maneira que:

- 1) O potencial é simétrico: $V(x_i - x_j) = V(x_j - x_i)$;
- 2) A interação entre as partículas decai suficientemente rápida para distâncias grandes (condição assintótica): $\lim_{x_i - x_j \rightarrow \pm\infty} V(|x_i - x_j|) = 0$;
- 3) O potencial é repulsivo: a derivada do potencial em relação à posição relativa é $D_{|x_i - x_j|} V(|x_i - x_j|) < 0$;
- 4) As partículas são impenetráveis: $\lim_{x_i - x_j \rightarrow 0} V(|x_i - x_j|) = \infty$, de maneira que $-\infty < x_i < x_j < \infty$, ou seja, a ordem das partículas é preservada após a interação. Nesse caso, não importa se as partículas são bósons ou férmions;
- 5) O sistema apresenta invariância galileana¹⁷, conservação de energia e de momento.

Analisemos dois casos particulares do hamiltoniano acima:

I) $N = 2$

Considere as duas partículas se aproximando entre si, com momentos (clássicos) p_1 e p_2 e longe o suficiente para serem consideradas livres; nessa condição assintótica, a função de onda do sistema é o produto de duas ondas planas, $\psi_1(x_1, x_2) \rightarrow e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)}$ ($k_i = p_i$ pois $\hbar = 1$). Quando as partículas são espalhadas, os momentos e as energias mudam conforme as respectivas leis de conservação, e elas se afastam entre si. Para um afastamento grande

¹⁶ \mathbf{I} é o operador identidade. Escrevemos $V(x_i - x_j)\mathbf{I}$ para manter a coerência com o fato de o hamiltoniano quântico ser um operador, mas adotamos $V(x_i - x_j)$ por uma questão de simplicidade de notação.

¹⁷A invariância galileana estabelece que as leis da Mecânica Clássica são as mesmas em qualquer referencial inercial.

o suficiente, as duas partículas se comportam novamente como partículas livres, mas agora com momentos $p_1^{\text{depois}} = p_2$ e $p_2^{\text{depois}} = p_1$, visto que elas têm massas iguais. Isso significa que a amplitude da função de onda espalhada $\psi_2(x_1, x_2)$ é apenas um deslocamento de fase dependente apenas do momento relativo, $\vartheta \equiv \vartheta(k_1 - k_2)$ ¹⁸, por causa da invariância galileana, ou seja, $\psi_2(x_1, x_2) \longrightarrow -e^{i\vartheta} e^{i(k_2 x_1 + k_1 x_2)}$. Logo, a função de onda assintótica do sistema é

$$\psi(x_1, x_2) \longrightarrow e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)} - e^{i\vartheta} e^{i(k_2 x_1 + k_1 x_2)}, \quad x_1 \ll x_2. \quad (2.7)$$

A função de onda $\psi(x_1, x_2)$ pode ser expressa como uma superposição de ondas planas,

$$\psi(x_1, x_2) \longrightarrow \sum_{\mathcal{P}} \psi(\mathcal{P}) e^{i(k_{\mathcal{P}1} x_1 + k_{\mathcal{P}2} x_2)} = \psi(12) e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)} + \psi(21) e^{i(k_2 x_1 + k_1 x_2)}, \quad x_1 \ll x_2, \quad (2.8)$$

em que \mathcal{P} são permutações dos inteiros do conjunto $\{1, 2\}$. Comparando as Eqs. (2.8) com a (2.7), obtemos que

$$\frac{\psi(21)}{\psi(12)} = -e^{-i\vartheta}. \quad (2.9)$$

Este é um exemplo particular de um espalhamento não difrativo, no qual as partículas comportam-se como partículas livres na região assintótica após a interação; consequentemente, a função de onda espalhada se mantém como uma onda plana. A Eq. (2.8) é o protótipo de soluções *Ansatz* de Bethe para problemas de espalhamento.

II) $N = 3$

No caso $N = 2$, os momentos após o espalhamento são unicamente determinados pela conservação de momento e de energia,

$$p_1 + p_2 = p_1^{\text{depois}} + p_2^{\text{depois}}, \quad p_1^2 + p_2^2 = (p_1^{\text{depois}})^2 + (p_2^{\text{depois}})^2,$$

pois temos um sistema de duas equações a duas variáveis. Entretanto, os casos com $N > 2$ são diferentes, pois temos duas equações a N variáveis, ou seja, não é mais possível determinar, em geral, todos os momentos assintóticos após o espalhamento das partículas de forma única. Para o nosso exemplo com $N = 3$, temos

$$p_1 + p_2 + p_3 = p_1^{\text{depois}} + p_2^{\text{depois}} + p_3^{\text{depois}}, \quad p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 = (p_1^{\text{depois}})^2 + (p_2^{\text{depois}})^2 + (p_3^{\text{depois}})^2.$$

Assim, seria necessário mais uma lei de conservação para fixar os momentos para um dos $3! = 6$ arranjos possíveis. Desse modo, a função de onda assintótica geral do sistema é a soma de uma função de onda de Bethe $\psi_B(x_1, x_2, x_3)$ e uma função de onda de difração

¹⁸O deslocamento de fase como função apenas do momento relativo é uma consequência da invariância galileana. Por conseguinte, revertendo a sequência de espalhamentos, muda-se o sinal do deslocamento de fase, ou seja, $\vartheta(k_1 - k_2) = -\vartheta(k_2 - k_1)$

$$\psi_{\text{dif}}(x_1, x_2, x_3),$$

$$\psi(x_1, x_2, x_3) \longrightarrow \psi_{\text{B}}(x_1, x_2, x_3) + \psi_{\text{dif}}(x_1, x_2, x_3). \quad (2.10)$$

A função de onda de Bethe para $N = 3$ é a superposição de $3! = 6$ ondas planas,

$$\psi_{\text{B}}(x_1, x_2, x_3) \longrightarrow \sum_{\mathcal{P}} \psi(\mathcal{P}) e^{i(k_{\mathcal{P}1}x_1 + k_{\mathcal{P}2}x_2 + k_{\mathcal{P}3}x_3)}, \quad (2.11)$$

sendo \mathcal{P} as permutações dos inteiros do conjunto $\{1, 2, 3\}$:

$$(123), \quad (231), \quad (312),$$

$$(132), \quad (213), \quad (321).$$

Cada par de permutações corresponde a um possível espalhamento de dois corpos (troca dos números de onda) e, assim, podemos determinar o desvio de fase correspondente. Por exemplo, identificando as partículas nas posições $x_1 < x_2 < x_3$ como **1**, **2** e **3**, respectivamente, o desvio de fase para a permutação $(123) \rightarrow (213)$ descreve o espalhamento de dois corpos entre as partículas **1** e **2**,

$$\frac{\psi(213)}{\psi(123)} = -e^{-i\vartheta_{12}}.$$

Espalhamentos sem difração possuem a propriedade de gerar o mesmo resultado final de uma sequência de espalhamentos na região assintótica; para ilustrar esta propriedade, basta considerarmos as amplitudes da função de onda que mudam em cada espalhamento. Tomemos, por exemplo, o arranjo inicial (123) , cuja amplitude é $\psi(123)$. Há duas sequências diferentes de espalhamentos que termina com a amplitude $\psi(321)$, ou seja, o arranjo final dos números de onda das partículas é (321) , mas mantendo a ordem espacial $x_1 < x_2 < x_3$ das partículas **1**, **2** e **3**. De fato, indicando o espalhamento pela seta \Rightarrow e identificando sobre elas as partículas espalhadas, temos:

$$\begin{aligned} \psi(123) &\xRightarrow{\mathbf{1 \ e \ 2}} \psi(213) \xRightarrow{\mathbf{2 \ e \ 3}} \psi(231) \xRightarrow{\mathbf{1 \ e \ 2}} \psi(321), \\ \psi(123) &\xRightarrow{\mathbf{2 \ e \ 3}} \psi(132) \xRightarrow{\mathbf{1 \ e \ 2}} \psi(312) \xRightarrow{\mathbf{2 \ e \ 3}} \psi(321). \end{aligned}$$

Consequentemente, a diferença de fase final deve ser a mesma nas duas sequências:

$$\frac{\psi(321)}{\psi(123)} = \frac{\psi(321)}{\psi(231)} \frac{\psi(231)}{\psi(213)} \frac{\psi(213)}{\psi(123)} = (-e^{-i\vartheta_{23}})(-e^{-i\vartheta_{13}})(-e^{-i\vartheta_{12}}) = -e^{-i(\vartheta_{12} + \vartheta_{23} + \vartheta_{13})},$$

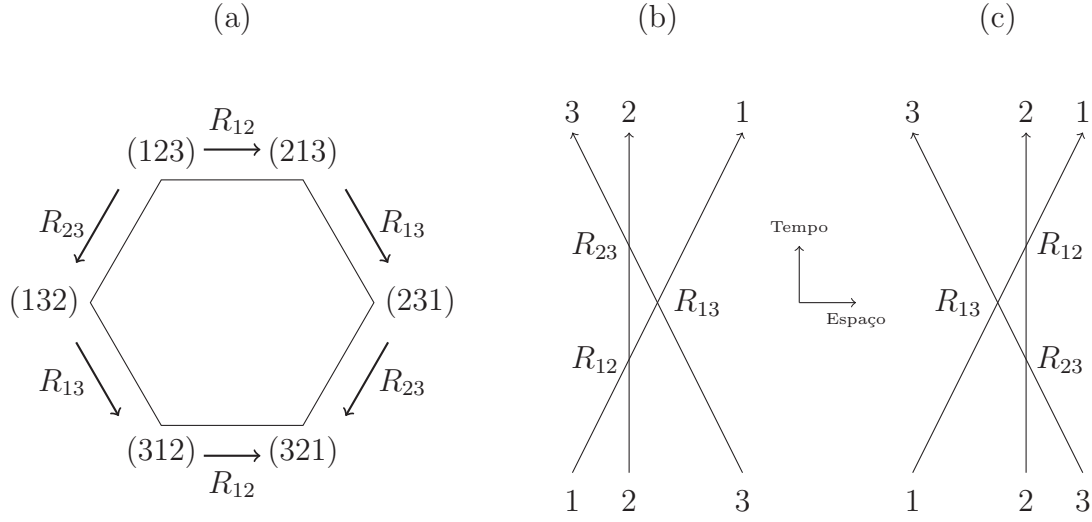


Figura 2.12: (a) Representação da equação de Yang-Baxter: sendo (123) o arranjo inicial dos números de onda das partículas, há dois caminhos que levam ao mesmo arranjo final (321): o horário com a ação dos operadores R_{12} , R_{13} e R_{23} e o anti-horário com a ação dos operadores R_{23} , R_{13} e R_{12} . Em (b) e (c) estão representados os diagramas espaço-tempo para as duas sequências de espalhamentos de (a) horário e anti-horário, respectivamente. Esses diagramas são uma forma alternativa para a visualização da equivalência entre as duas sequências: basta transladar simetricamente o eixo 2.

$$\frac{\psi(321)}{\psi(123)} = \frac{\psi(321)}{\psi(312)} \frac{\psi(312)}{\psi(132)} \frac{\psi(132)}{\psi(123)} = -e^{-i(\vartheta_{12} + \vartheta_{23} + \vartheta_{13})}.$$

Esse resultado ilustra uma condição de consistência para a integrabilidade quântica representada pela equação de Yang-Baxter,

$$R_{12}R_{13}R_{23} = R_{23}R_{13}R_{12},$$

em que R_{ij} são os operadores de espalhamento entre as partículas i e j . A Fig. 2.12 são duas visualizações da equação de Yang-Baxter e, consequentemente, da integrabilidade quântica. Na Fig. 2.12(a), a equivalência das duas sequências de espalhamentos aparece pela simetria do polígono (hexágono). Já na Fig. 2.12(b), essa equivalência é manifestada pela simples translação simétrica do eixo 2, que é suficiente para a troca na sequência de espalhamentos.

A função de onda de difração $\psi_{\text{dif}}(x_1, x_2, x_3)$ corresponde ao espalhamento de três partículas em uma região $x_1 \approx x_2 \approx x_3$, na qual emerge uma onda esférica na região assintótica. Fixando o momento e energia totais, os momentos das partículas como $\tilde{k}_1 <$

$\tilde{k}_2 < \tilde{k}_3$ e $x_1 \ll x_2 \ll x_3$, a função de onda de difração é

$$\psi_{\text{dif}}(x_1, x_2, x_3) \longrightarrow \iiint S(\tilde{k}_1, \tilde{k}_2, \tilde{k}_3) e^{i(\tilde{k}_1 x_1 + \tilde{k}_2 x_2 + \tilde{k}_3 x_3)} d\tilde{k}_1 d\tilde{k}_2 d\tilde{k}_3, \quad (2.12)$$

em que $S(\tilde{k}_1, \tilde{k}_2, \tilde{k}_3)$ é a amplitude associada ao espalhamento difrativo. Se houver alguma outra relação dependente dos momentos das partículas que fixe de forma única os momentos assintóticos após o espalhamento, a integral será nula e, nesse caso particular, a função de onda assintótica para as três partículas será apenas a função de onda de Bethe.

O problema de três partículas interagentes em 1D, como mostrado acima, é o sistema mais simples que não é integrável em geral e, por isso tem sido bastante analisado na literatura. J. B. McGuire, por exemplo, mostrou explicitamente a conexão entre o problema de três partículas interagentes por um potencial delta de Dirac (nesse caso, como o alcance da interação do potencial é zero, qualquer distância já caracteriza uma região assintótica, de maneira que a função de onda dada pela Eq. (2.10) pode ser expressa com um sinal de igualdade) e o problema de difração de ondas eletromagnéticas em cunhas e cantos (dois segmentos de reta com um certo ângulo de abertura) [138]: considerando o hamiltoniano do sistema

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{1}{m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{1}{m_3} \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right) + A_1 \delta(x_1 - x_2) + A_2 \delta(x_2 - x_3) + A_3 \delta(x_1 - x_3),$$

em que m_i são as massas das partículas e A_i são as intensidades dos potenciais delta de Dirac, com $i \in \{1, 2, 3\}$, a mudança de variáveis para as coordenadas relativas X e Y e para a coordenada de centro de massa Z ,

$$X = \sqrt{\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}} (x_1 - x_2), \quad Y = \sqrt{\frac{m_3 (m_1 + m_2)}{m_1 + m_2 + m_3}} \left(\frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2} - x_3 \right),$$

$$Z = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2 + m_3 x_3}{\sqrt{m_1 + m_2 + m_3}},$$

resulta em um hamiltoniano com os movimentos relativos separados do movimento do centro de massa, ou seja, $H = H_r + H_{\text{cm}}$, em que

$$H_r = -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} \right) + A_1 \delta \left(\frac{X}{\mu_{12}} \right) + A_2 \delta \left(\frac{X \cos \rho_1 + Y \sin \rho_1}{\mu_{23}} \right) + A_3 \delta \left(\frac{X \cos \rho_2 - Y \sin \rho_2}{\mu_{13}} \right)$$

e

$$H_{\text{cm}} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial Z^2},$$

e os demais parâmetros dados por

$$\frac{1}{\mu_{ij}} = \sqrt{\frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_j}}, \quad M_{123} = m_1 + m_2 + m_3,$$

$$\operatorname{tg} \rho_1 = \sqrt{\frac{M_{123} m_2}{m_1 m_2}}, \quad \operatorname{tg} \rho_2 = \sqrt{\frac{M_{123} m_1}{m_2 m_3}}, \quad \operatorname{tg} \rho_3 = \sqrt{\frac{M_{123} m_3}{m_1 m_2}}. \quad (2.13)$$

Como os potenciais delta de Dirac dependem apenas das posições relativas, o centro de massa do sistema tem movimento livre. Então, a análise do problema pode ser realizado no referencial do centro de massa e o sistema é descrito completamente pela equação de Schrödinger nas coordenadas relativas,

$$H_r \psi(X, Y) = E_r \psi(X, Y),$$

a qual pode ser interpretada como o movimento livre de uma única partícula em um espaço bidimensional (2D) limitada pelas paredes em $X = 0$, $X = Y \operatorname{tg} \rho_2$ e $X = -Y \operatorname{tg} \rho_1$ estabelecidas pelos potenciais delta de Dirac (veja a Fig. 2.13(a)).

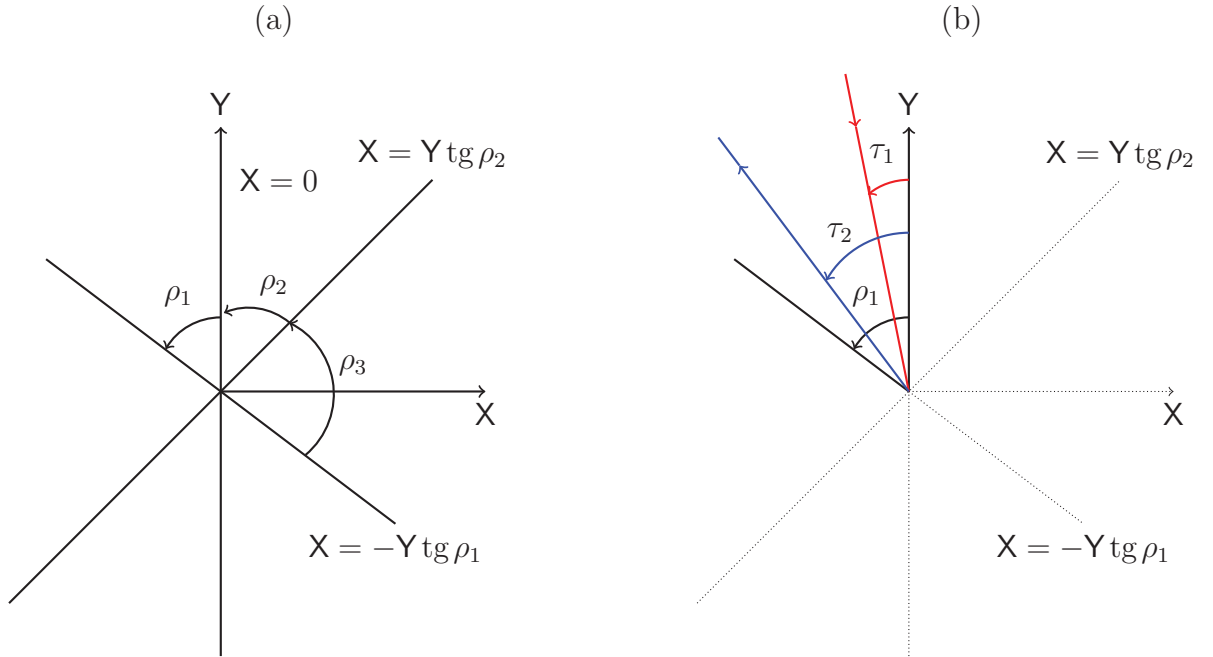


Figura 2.13: (a) Espaço de configuração no referencial do centro de massa de um sistema 1D de três partículas interagentes. As paredes em $X = -Y \operatorname{tg} \rho_1$, $X = 0$ e $X = Y \operatorname{tg} \rho_2$ correspondem aos potenciais delta de Dirac de interação das partículas. Essas paredes formam seis cunhas, ou três pares de cunhas de ângulo ρ_i . Para coeficientes A_i finitos, uma partícula pode ser refletida ou transmitida pelas paredes, transitando pelas cunhas. (b) Quando os coeficientes A_i são infinitos, a partícula ficará confinada em uma das cunhas. Nesta figura, é mostrada a direção de uma partícula ou de uma onda eletromagnética pela cunha de ângulo de abertura ρ_1 , em que τ_1 é o ângulo de chegada e τ_2 é o ângulo de saída.

Há dois casos possíveis em relação aos coeficientes A_i : eles podem ser infinitos, o que significa que a função de onda é nula nas paredes ou, equivalentemente, as partículas em 1D são impenetráveis; e podem ser finitos, significando que a partícula poderá ser refletida ou transmitida pelas paredes. Em 1D, isso corresponde a colisão ou tunelamento das partículas entre si.

No limite de A_i infinito, o problema de três partículas interagentes em 1D é equivalente ao problema de uma onda eletromagnética incidindo em cunhas e cantos (veja a Fig. 2.13(b)). A. Sommerfeld estudou este problema em 1896 [139] para qualquer ângulo $\frac{m\pi}{n}$ no qual ele aplicou a teoria de funções multivaloradas para obter as soluções da equação da onda, correspondendo às folhas de uma superfície de Riemann [140], um ponto em comum com a versão clássica do sistema. Desde então, o problema da difração em cunhas tem sido abordado tanto em problemas eletromagnéticos [141–146] quanto em análises semiclássicas de bilhares quânticos [147–151]. A Fig. 2.13(b) mostra a situação de uma onda incidindo em um ângulo τ_1 e refletida em um ângulo τ_2 em uma cunha com um ângulo de abertura ρ_1 . A sua solução assintótica é formada por uma onda incidente, acrescida das soluções de reflexão de dois corpos e da solução difrativa [138],

$$\psi = \psi_{\text{incidente}} + \psi_{2 \text{ corpos}} + f(\tau_1, \tau_2, \rho_1) \frac{e^{ik_c r}}{\sqrt{r}} + O\left(r^{-\frac{3}{2}}\right), \quad (2.14)$$

em que

$$f(\tau_1, \tau_2, \rho_1) = \frac{\sqrt{\lambda_c} \sin\left(\frac{\pi^2}{\rho_1}\right)}{4\rho_1} \frac{\sin\left(\frac{\pi\tau_1}{\rho_1}\right) \sin\left(\frac{\pi\tau_2}{\rho_1}\right)}{\left(\sin\left(\frac{\pi\tau_1}{\rho_1}\right) \sin\left(\frac{\pi\tau_2}{\rho_1}\right)\right)^2 - \left(\cos\left(\frac{\pi\tau_1}{\rho_1}\right) \cos\left(\frac{\pi\tau_2}{\rho_1}\right) - \cos\left(\frac{\pi^2}{\rho_1}\right)\right)^2}, \quad (2.15)$$

k_c é o módulo do vetor de onda, r é a posição radial em relação ao vértice da cunha e λ_c é o comprimento de onda. Como a Eq. (2.15) está relacionada ao problema de três partículas impenetráveis em 1D, a comparação com a Eq. (2.10) permite concluir que a função de onda difrativa $\psi_{\text{dif}}(x_1, x_2, x_3)$ é proporcional ao termo difrativo $f(\tau_1, \tau_2, \rho_1) \frac{e^{ik_c r}}{\sqrt{r}}$, ou seja, obtemos indiretamente a integral da Eq. (2.12).

A Eq. (2.15) possui o termo $\sin\left(\frac{\pi^2}{\rho_1}\right)$ que se anula para todo ângulo de abertura $\rho_1 = \frac{\pi}{n}$; consequentemente, o termo difrativo $f(\tau_1, \tau_2, \rho_1) = 0$. Isso significa que difração em cunhas ocorre apenas para ângulos de abertura $\rho_1 \neq \frac{\pi}{n}$. Como esse problema equivale ao de três partículas impenetráveis em 1D, concluimos que esse sistema é integrável apenas quando elas tiverem massas iguais.

Para coeficientes A_i finito, um caso particular interessante é aquele em que todos eles

são numericamente iguais e as três partículas têm a mesma massa; consequentemente, pela Eq. (2.13), os ângulos $\rho_i = \frac{\pi}{3}$, para $i \in \{1, 2, 3\}$. Logo, o espaço 2D da Fig. 2.13(a) é dividido em seis câmaras iguais (câmaras de Weyl) [152], gerando a Fig. 2.14. Como os ângulos de abertura são da forma $\frac{\pi}{n}$, esse caso também não apresenta difração; consequentemente, o sistema de três partículas com massas iguais tuneláveis em 1D é integrável.

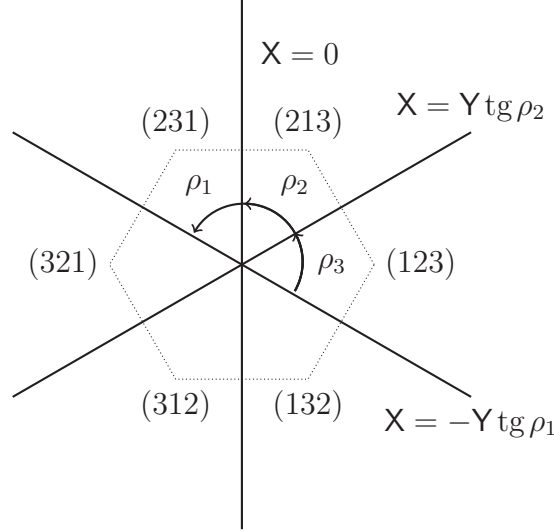


Figura 2.14: Espaço de configuração no referencial do centro de massa de um sistema 1D de três partículas interagentes de massas iguais e que podem tunelar entre si. As linhas contínuas representam os potenciais delta de Dirac com intensidades finitas e iguais. O hexágono não representa uma limitação espacial, mas sim uma referência visual. Cada câmara representa um arranjo espacial das três partículas.

O espaço de configuração do sistema no referencial do centro de massa das três partículas da Fig. 2.14 mostra seis cunhas ou câmaras idênticas. Cada câmara representa uma disposição espacial dessas três partículas. Por exemplo, a câmara com o arranjo (123) significa que as posições das três partículas são $x_1 < x_2 < x_3$; caso a partícula 1 tunele com a 2, o arranjo espacial passa a ser $x_2 < x_1 < x_3$, e a partícula nesse espaço 2D passa para a câmara identificada pelo arranjo (213), e assim por diante. Como as câmaras são todas iguais, as paredes representadas pelas linhas contínuas funcionam como espelhos, refletindo perfeitamente a função de onda de uma câmara para outra (pelo menos para o caso onde a função de onda é simétrica, como é o caso de bósons), ou seja, a função de onda neste espaço de configuração terá um aspecto caleidoscópico [153]. Se houver espalhamento difrativo, cada câmara deve ter uma solução específica.

Se o sistema não for quanticamente integrável, a função de onda por *Ansatz* de Bethe é insuficiente para descrever o sistema quântico. Então, J. B. McGuire e C. A. Hurst

determinaram a função de onda de difração para três partículas impenetráveis em 1D, por meio do *Ansatz* de Sommerfeld [154, 155], consistindo na suposição que a Eq. (2.12) seja dada pela integral de Sommerfeld,

$$\psi_{\text{dif}}(r, \phi) = \int_{\mathfrak{C}} f(\phi, u) e^{ik_c r \cos u} du, \quad (2.16)$$

em que $\psi_{\text{dif}}(r, \phi)$ está em coordenadas cilíndricas, ϕ é um ângulo limitado pela abertura angular da cunha, k_c é o número de onda, $u \in \mathbb{C}$, $f(\phi, u)$ é a amplitude da onda $e^{ik_c r \cos u}$ e \mathfrak{C} é um caminho no plano complexo. A integral de Sommerfeld satisfaz a equação de Helmholtz, que é a equação de Schrödinger estacionária desse sistema. Dessa forma, embora não trivial, é possível determinar a função de onda de difração e, juntamente com a função de onda de Bethe, ter a solução completa do problema.

A. Lamacraft também usou o *Ansatz* de Sommerfeld para o caso acima, mas com partículas penetráveis, mostrando que o espalhamento difrativo ocorre mesmo quando as três partículas têm massas iguais, bastando que a intensidade dos potenciais delta de Dirac sejam diferentes [156].

Nas próximas duas seções, expomos o modelo de Lieb-Liniger e de M. Gaudin conforme as referências [5, 15, 33], pois serão a base para o nosso problema.

2.2 O Modelo de Lieb-Liniger

O modelo de Lieb-Liniger consiste de N bósons de massa m , sem *spin*, dispostos em uma região 1D finita sob condição de contorno periódica e interagindo por um potencial repulsivo $V(x_i, x_j) = \lambda \delta(x_i - x_j)$, com $i \neq j$. Inicialmente, escrevemos a equação de Schrödinger $H\psi = E\psi$ para esse sistema em uma região 1D qualquer,

$$\left(-\sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + 2\lambda \sum_{i < j}^N \delta(x_i - x_j) \right) \psi = E\psi, \quad (2.17)$$

em que $\hbar = 2m = 1$ e $\psi := \psi(x_1, \dots, x_N)$.

Como o potencial de interação é um delta de Dirac, o problema representado pela Eq. (2.17) pode ser substituído por um problema quântico de partícula livre nas regiões onde $x_i \neq x_j$, de tal maneira que a função de onda seja contínua em $x_i = x_j$ e a sua primeira

derivada seja descontínua em uma vizinhança infinitesimal de $x_i = x_j$,

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j}\right)\psi|_{x_i-x_j=0^+} - \left(\frac{\partial}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j}\right)\psi|_{x_i-x_j=0^-} = 2\lambda\psi|_{x_i=x_j}. \quad (2.18)$$

Confinando os bósons em uma região finita $D : 0 \leq x_1 \leq \dots \leq x_N \leq L$, o problema acima pode ser expresso como a de partículas livres com o acréscimo da condição de contorno da interação delta de Dirac. Além disso, como as partículas são bósons, a função de onda deve ser simétrica, o que significa que as primeiras derivadas em $x_i - x_j = 0^+$ e $x_i - x_j = 0^-$ são iguais. Dessa forma, temos

$$-\sum_{i=1}^N \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_i^2} = E\psi, \quad (2.19)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j}\right)\psi|_{x_i-x_j=0^+} = \lambda\psi|_{x_i=x_j}. \quad (2.20)$$

Devemos impor agora a condição de contorno periódica. Definindo $\psi(L, x_2, \dots, x_N) \equiv \psi(x_2, \dots, x_N, L)$, obtemos a condição de contorno periódica sobre a função de onda e sobre a sua primeira derivada,

$$\psi(0, x_2, \dots, x_N) = \psi(x_2, \dots, x_N, L), \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_1}\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)|_{x_1=0} = \frac{\partial}{\partial x_1}\psi(x_2, \dots, x_N, x_1)|_{x_1=L}. \quad (2.22)$$

Assim, as Eqs. (2.19-2.22) determinam completamente o nosso problema no domínio D .

Agora, podemos considerar qualitativamente o nosso problema. Os bósons comportam-se como partículas livres nas regiões $x_i \neq x_{i+1}$; então, a função de onda é expressa em termos de ondas planas. Como a intensidade λ do potencial de interação é finita, os bósons podem colidir elasticamente ou tunelar entre si. Se colidirem, a transferência de momento linear é apenas uma permutação desses momentos; se tunelarem, ainda podemos considerar a ocorrência de permutação de momentos, pois os bósons são indistinguíveis. Essas observações justificam, então, a suposição de que a função de onda do modelo de Lieb-Liniger seja uma soma sobre todas as permutações de N momentos, ou de N partículas no domínio D ,

$$\psi(x_1, \dots, x_N) = \sum_{\mathcal{P} \in S_N} a(\mathcal{P}) \exp\left(i \sum_{j=1}^N k_{\mathcal{P}_j} x_j\right), \quad (2.23)$$

em que \mathcal{P} são permutações de inteiros $1, \dots, N$, ou seja, $N!$ permutações e $k_{\mathcal{P}_j}$ são os números de onda (por abuso de linguagem, vamos nos referir aos números de onda como

momentos). Temos, então, o *Ansatz* de Bethe do problema.

Para se determinar os coeficientes $a(\mathcal{P})$, usamos a Eq. (2.23) para escrever duas funções de onda em termos de dois conjuntos de permutações de momentos na posição de encontro de duas partículas quaisquer,

$$\mathcal{P} \in \{\mathbf{p}, \mathbf{q}, k_{\mathbf{p}_3}, \dots, k_{\mathbf{p}_N}\}, \quad \mathbf{p} = k_{\mathbf{p}_1}, \quad \mathbf{q} = k_{\mathbf{p}_2},$$

$$\mathcal{Q} \in \{\mathbf{q}, \mathbf{p}, k_{\mathbf{p}_3}, \dots, k_{\mathbf{p}_N}\}.$$

Substituindo as duas funções de onda na Eq. (2.20), obtemos

$$a(\mathcal{Q}) = a(\mathcal{P}) \frac{\lambda - \imath(\mathbf{q} - \mathbf{p})}{\lambda + \imath(\mathbf{q} - \mathbf{p})} = a(\mathcal{P}) e^{\imath\theta_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2}}. \quad (2.24)$$

A Eq. (2.24) mostra que a interação entre dois bósons implica em uma diferença de fase. Podemos escolher a fase de tal maneira a se ter uma forma racional para o coeficiente $a(\mathcal{P})$,

$$a(\mathcal{P}) = \prod_{i < j} \left(1 + \frac{\imath\lambda}{k_{\mathcal{P}i} - k_{\mathcal{P}j}} \right). \quad (2.25)$$

Pela condição de contorno dada pela Eq. (2.21) e \mathcal{C} é uma permutação cíclica de $1, \dots, N$, obtemos

$$a(\mathcal{P}\mathcal{C}) e^{\imath k_{\mathcal{P}i} L} = a(\mathcal{P}), \quad (2.26)$$

e com o auxílio da Eq. (2.25), a condição de quantização do sistema é

$$k_i = \frac{2\pi n_i}{L} + \frac{2}{L} \sum_j \arctg \frac{\lambda}{k_i - k_j}, \quad (2.27)$$

em que n_i são inteiros positivos.

Portanto, como determinamos os coeficientes $a(\mathcal{P})$ e os momentos k_i , a Eq. (2.19) dá os autovalores de energia exatos do sistema,

$$E = \sum_{i=1}^N k_i^2.$$

A propriedade de completeza, ou fechamento, que garante que o conjunto de auto-funções formem uma base para qualquer função de onda, foi demonstrada por M. Gau-

din [157, 158] para o domínio $-\infty < x_1 < \dots < x_N < \infty$, com o fator de normalização

$$\mathcal{G} = \prod_{i < j} \left(1 + \frac{\lambda^2}{(k_i - k_j)^2} \right).$$

Devido à superposição de ondas planas, a integral de normalização não é trivial, pois é preciso se apelar para a Teoria de Distribuições em um espaço N dimensional.

2.3 O Modelo de Michel Gaudin

O modelo de Lieb-Liniger usa a condição de contorno periódica pela conveniência de não considerar o comportamento da função de onda nas bordas de uma região 1D finita. Pode-se pensar também que o modelo de Lieb-Liniger se refere a um gás de Bose de partículas interagentes dispostos em uma circunferência.

M. Gaudin substituiu a condição de contorno periódica por duas condições de contorno que impõe o anulamento da função de onda nas extremidades da região finita que coincide com o intervalo $[0, L]$ (caixa 1D),

$$\psi(0, x_2, \dots, x_N) = 0, \quad (2.28)$$

$$\psi(x_1, x_2, \dots, L) = 0, \quad (2.29)$$

correspondendo a condições de contorno de Dirichlet [159].

Gaudin resolveu primeiro o problema para uma caixa semi-infinita, impondo a condição dada pela Eq. (2.28) e assumindo, como *Ansatz*, as soluções-base dadas por

$$\psi_{\mathbb{K}}(x_1, \dots, x_N) = \sum_{\mathcal{P} \in S_N} a(\mathcal{P}) \exp \left(i \sum_{j=1}^N k_{\mathcal{P}j} x_j \right). \quad (2.30)$$

Precisamos considerar todas as possibilidades de combinações de momentos, com valores positivos e negativos, pois devemos levar em conta a reflexão das partículas na parede em 0 do intervalo $[0, L]$. Assim, o conjunto de momentos $\mathbb{K} = \{k_1, \dots, k_N\}$, em que $k_i = \epsilon_i |k_i|$, $\epsilon_i = \pm 1$. Então, é necessário realizar um segundo *Ansatz*

$$\psi_{|\mathbb{K}|}(x_1, \dots, x_N) = \sum_{\epsilon_1 \dots \epsilon_N} A(\epsilon_1 \dots \epsilon_N) \psi_{\mathbb{K}}(x_1, \dots, x_N), \quad (2.31)$$

em que $|\mathbb{K}| = \{|k_1|, \dots, |k_N|\}$. Determinamos os novos coeficientes $A(\epsilon_1 \dots \epsilon_N)$ através da

Eq. (2.28) e a Eq. (2.30),

$$\sum_{\epsilon_1 \dots \epsilon_N} A(\epsilon_1 \dots \epsilon_N) \sum_{\mathcal{P} \in S_N} a(\mathcal{P}) e^{i(k_{\mathcal{P}2}x_2 + \dots + k_{\mathcal{P}Nj}x_N)} = 0.$$

Esse anulamento deve ser satisfeito com os pares de ondas planas com momentos simétricos, $e^{i(\epsilon_1|k_{\mathcal{P}1}|x_1 + \epsilon_2|k_{\mathcal{P}2}|x_2 + \dots + \epsilon_2|k_{\mathcal{P}Nj}|x_N)}$ e $e^{i(-\epsilon_1|k_{\mathcal{P}1}|x_1 + \epsilon_2|k_{\mathcal{P}2}|x_2 + \dots + \epsilon_2|k_{\mathcal{P}Nj}|x_N)}$; assim, fixando-se um momento $k_{\varpi} = \epsilon_{\varpi}|k_{\varpi}|$, de modo que a equação acima possa ser reescrita como

$$A(\epsilon_1 \dots \epsilon_{\mathcal{P}1} \dots \epsilon_N) \prod_{\varpi \neq \mathcal{P}1} \left(1 + \frac{i\lambda}{k_{\mathcal{P}1} - k_{\varpi}}\right) + A(\epsilon_1 \dots - \epsilon_{\mathcal{P}1} \dots \epsilon_N) \prod_{\varpi \neq \mathcal{P}1} \left(1 + \frac{i\lambda}{-k_{\mathcal{P}1} - k_{\varpi}}\right) = 0,$$

para todo momento possível. Então, essa relação é satisfeita escolhendo

$$A(\epsilon_1 \dots \epsilon_N) = \prod_{i < j} \left(1 - \frac{i\lambda}{k_i + k_j}\right) \epsilon_1 \dots \epsilon_N.$$

Portanto, substituindo na Eq. (2.31), obtemos

$$\psi_{\mathbb{K}}(x_1, \dots, x_N) = \sum_{\epsilon_1 \dots \epsilon_N} \sum_{\mathcal{P} \in S_N} \epsilon_1 \dots \epsilon_N \prod_{i < j} \left(1 - \frac{i\lambda}{k_i + k_j}\right) \left(1 + \frac{i\lambda}{k_{\mathcal{P}i} - k_{\mathcal{P}j}}\right) \exp\left(i \sum_{j=1}^N \epsilon_{\mathcal{P}j} k_{\mathcal{P}j} x_j\right). \quad (2.32)$$

Para termos uma função de onda válida na caixa 1D, procedemos de maneira análoga ao realizado acima, mas usando a condição de contorno dada pela Eq. (2.29). Como resultado, obtemos a seguinte condição,

$$e^{i2k_{\mathbf{p}}L} = \prod_{\mathbf{q} \neq \mathbf{p}} \frac{k_{\mathbf{q}} - k_{\mathbf{p}} - i\lambda}{k_{\mathbf{q}} - k_{\mathbf{p}} + i\lambda} \frac{k_{\mathbf{q}} + k_{\mathbf{p}} + i\lambda}{k_{\mathbf{q}} + k_{\mathbf{p}} - i\lambda}. \quad (2.33)$$

Calculando-se o logaritmo da Eq. (2.33), obtemos a condição de quantização

$$k_{\mathbf{p}} = \frac{\pi n_{\mathbf{p}}}{L} + \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{p}} \left(\arctg \frac{\lambda}{k_{\mathbf{p}} - k_{\mathbf{q}}} + \arctg \frac{\lambda}{k_{\mathbf{p}} + k_{\mathbf{q}}} \right), \quad (2.34)$$

em que $\mathbf{p} \in [1, N]$.

Portanto, substituindo a Eq. (2.32) na Eq. (2.19), temos os autovalores de energia exatos,

$$E = \sum_{\mathbf{p}=1}^N k_{\mathbf{p}}^2,$$

que é mesma do modelo de Lieb-Liniger.

***Ansatz* de Bethe e Grupos de Reflexão**

Michel Gaudin [33] percebeu que soluções do tipo *Ansatz* de Bethe possuem uma estrutura intrínseca de Grupos de Reflexão \mathbb{G} , de maneira que uma solução *Ansatz* de Bethe generalizada para qualquer elemento de $g \in \mathbb{G}$ é

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \sum_{g \in \mathbb{G}} a(g) e^{i(g\mathbf{k}, \mathbf{x})}, \quad (2.35)$$

em que \mathbf{x} e \mathbf{k} são vetores N dimensionais e (\cdot, \cdot) denota o produto escalar. Os coeficientes $a(g)$ são determinados pelas condições de contorno na região D e devem satisfazer as propriedades do grupo \mathbb{G} . A propriedade de simetria de reflexão, juntamente com a integrabilidade das soluções *Ansatz* de Bethe, levam ao espalhamento não difrativo das partículas, como demonstrado por E. Gutkin e B. Sutherland [34, 35].

H. S. M. Coxeter (1907-2003) demonstrou que há apenas 11 grupos de reflexão [33, 160–163]:

- 1) A_{N-1} , correspondendo a simplexos¹⁹ regulares em \mathbb{R}^{N-1} e estão associados ao grupo de permutações S_N (as posições de encontro das partículas $x_i = x_j$ definem um hiperplano em relação ao qual se realiza a reflexão);
- 2) B_N e C_N , correspondendo à simetria de hipercubo;
- 3) D_N , associado a permutações com troca de um número par de sinais, sendo um subgrupo de índice 2 de B_N , ou seja, a metade dos elementos de D_N pertencem a B_N ;
- 4) $I_2(N)$, é o grupo diedral o grupo diedral de ordem $2N$, associado ao grupo de simetria de polígonos regulares;
- 5) grupos de reflexão excepcionais $E_6, E_7, E_8, F_4, G_2, H_3$ e H_4 .

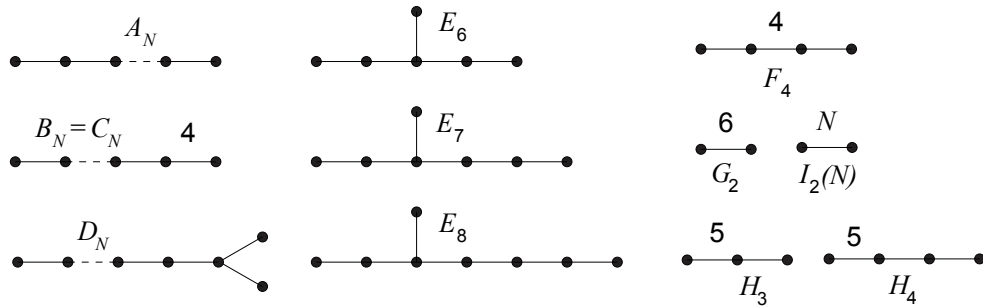


Figura 2.15: Grupos de Coxeter finitos são uma generalização de grupos de reflexão.

Esses grupos constituem os Grupos de Coxeter Finitos e são comumente representados pelos diagramas de Coxeter-Dynkin, Fig. 2.15, e definidos da seguinte maneira:

¹⁹Simplexos é uma generalização N dimensional de triângulos. Por exemplo, 2-simplexo é um triângulo; 3-simplexo é um tetraedro.

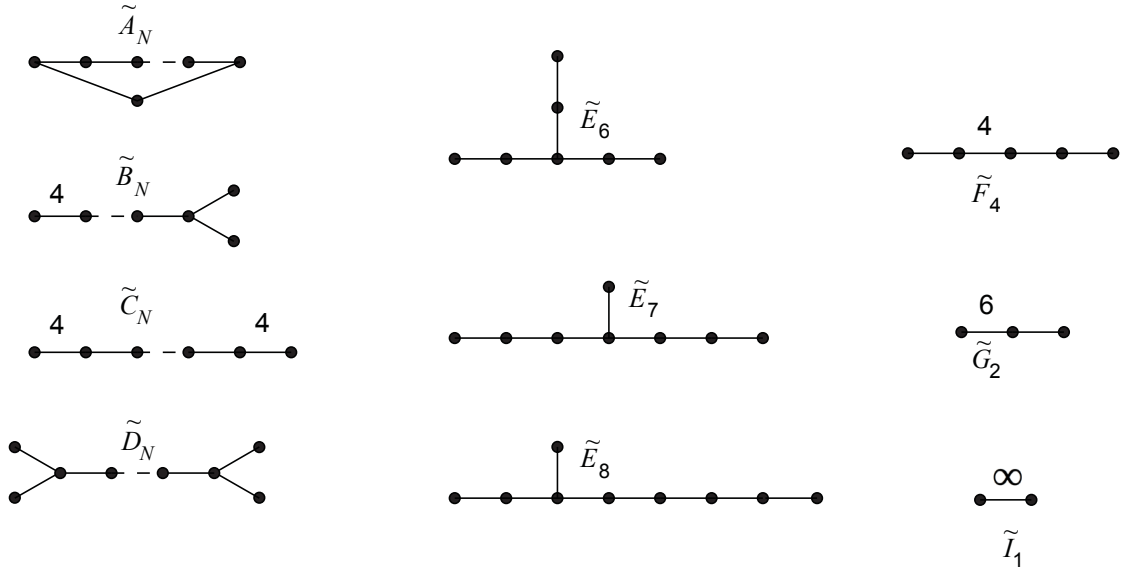


Figura 2.16: Grupos de Coxeter Afins: cada grupo de Coxeter pode ser estendido acrescentando um nó.

- (a) os nós são os hiperplanos²⁰ em relação aos quais ocorrem as reflexões, funcionando como “espelhos”;
- (b) as arestas representam os ângulos diedrais $\frac{180^\circ}{t}$ entre os hiperplanos, em que $t > 1$, como se fossem ângulos de abertura entre os “espelhos”;
- (c) o ângulos diedrais entre os hiperplanos são indicados explicitamente sobre a aresta sempre que $t > 3$.
- (d) para $t = 3$ (60°), fica subentendido pela sua ausência sobre as arestas;
- (e) para $t = 2$ (90°), não há aresta e os nós são representados isoladamente.

Para cada Grupo de Coxeter, há uma versão estendida, os Grupos de Coxeter Afins, consistindo na inclusão de um nó para descrever tesselações, ou ladrilhamentos, no espaço, apropriados para descrever contornos fechados, como os bilhares. Esses grupos são denotados sobrescrevendo neles um til, conforme se vê na Fig. 2.16.

Desse modo, como o modelo de Lieb-Liniger é formado por bósons dispostos em uma reta, cujos momentos são trocados por permutações, a simetria correspondente é de A_{N-1} e, conseqüentemente, o seu diagrama de Coxeter-Dynkin é uma cadeia linear de nós ligados por arestas simples, sem indicação de t ; isso é condizente com o espaço de configuração da Fig. 2.14 para o caso particular de três partículas de massas iguais em uma reta, pois a disposição entre os hiperplanos é de 60° . Já a solução por *Ansatz* de Bethe para a semirreta, a simetria correspondente é de B_N e de C_N , os quais possuem um dos “espelhos” com $t = 4$, concordando com o fato de o espaço de configuração ser uma cunha com um ângulo de abertura de 45° . Esses exemplos mostram que o ângulo entre os “espelhos”

²⁰Hiperplanos são planos N -dimensionais.

está relacionado com as massas das partículas do sistema, contanto que levemos em conta a relação entre bilhares e sistemas 1D com várias partículas. Então, é possível obter o sistema de partículas a partir de um desses grupos de reflexão. Isso foi realizado para o grupo de reflexão afim \tilde{F}_4 em [58] para estudar o problema quântico de quatro partículas impenetráveis confinadas em uma caixa 1D. Para isso, inicialmente consideramos seis partículas de massas m_i quaisquer em uma região 1D, em que $i \in \{0, 1, 2, 3, 4, 5\}$, e impomos os limites $m_0 \rightarrow \infty$ e $m_5 \rightarrow \infty$. A relação entre os ângulos definidos pelos hiperplanos e as massas de três partículas consecutivas,

$$\theta_{i(i+1)(i+2)} = \arctg \sqrt{\frac{m_{i+1}(m_i + m_{i+1} + m_{i+2})}{m_i m_{i+2}}}, \quad (2.36)$$

vai nos fornecer as razões de massas das quatro partículas de duas em duas. Pelo diagrama de Coxeter-Dynkin da Fig. 2.16, os ângulos entre os hiperplanos são $\frac{\pi}{3}$, $\frac{\pi}{4}$, $\frac{\pi}{3}$ e $\frac{\pi}{3}$, os quais identificamos com θ_{012} , θ_{123} , θ_{234} e θ_{345} , respectivamente. A substituição na Eq. (2.36), resultam nas seguintes relações de massas

$$m_1 = 3m, \quad m_2 = m, \quad m_3 = 2m, \quad m_4 = 6m, \quad (2.37)$$

cuja disposição espacial denotamos por $[[3126]]$, em que $x_1 < x_2 < x_3 < x_4$. Logo, para $\mathbb{G} = \tilde{F}_4$, a Eq. (2.35) fornece a função de onda por *Ansatz* de Bethe de quatro partículas impenetráveis com as massas dadas pela Eq. (2.37). Essa simetria corresponde à tesselação do espaço euclidiano 4-dimensional por 24 células, de modo que cada vértice é a fronteira de um 4-cubo [164].

No entanto, foi usada em [58] a disposição $[[6213]]$, a versão “espelhada” de $[[3126]]$. Logo, o diagrama de Dynkin também é “espelhada” e a relação entre as posições das partículas aqui é $x_4 < x_3 < x_2 < x_1$, ou seja, a disposição das massas está atrelada às câmaras que dividem o espaço de configuração do sistema. Assim, $[[6213]]$ também corresponde ao grupo de reflexão \tilde{F}_4 e, por isso, admite uma solução por *Ansatz* de Bethe quando as partículas são impenetráveis. A sua simetria leva à tesselação do espaço por um octaedro 4-dimensional (ou octacubo), no qual cada vértice é a fronteira de um espaço de 24-células [164], uma simetria diferente da disposição $[[3126]]$. Essa distinção viola a propriedade caleidoscópica necessária para se ter uma solução por *Ansatz* de Bethe se as partículas tunelassem entre si. Essas duas simetrias possíveis de \tilde{F}_4 já são previstas pela dualidade de poliedros, uma propriedade geométrica necessária para a preservação de simetrias [165]²¹.

²¹A dualidade de poliedros estabelece que qualquer um deles está associado um dual, tal que os vértices

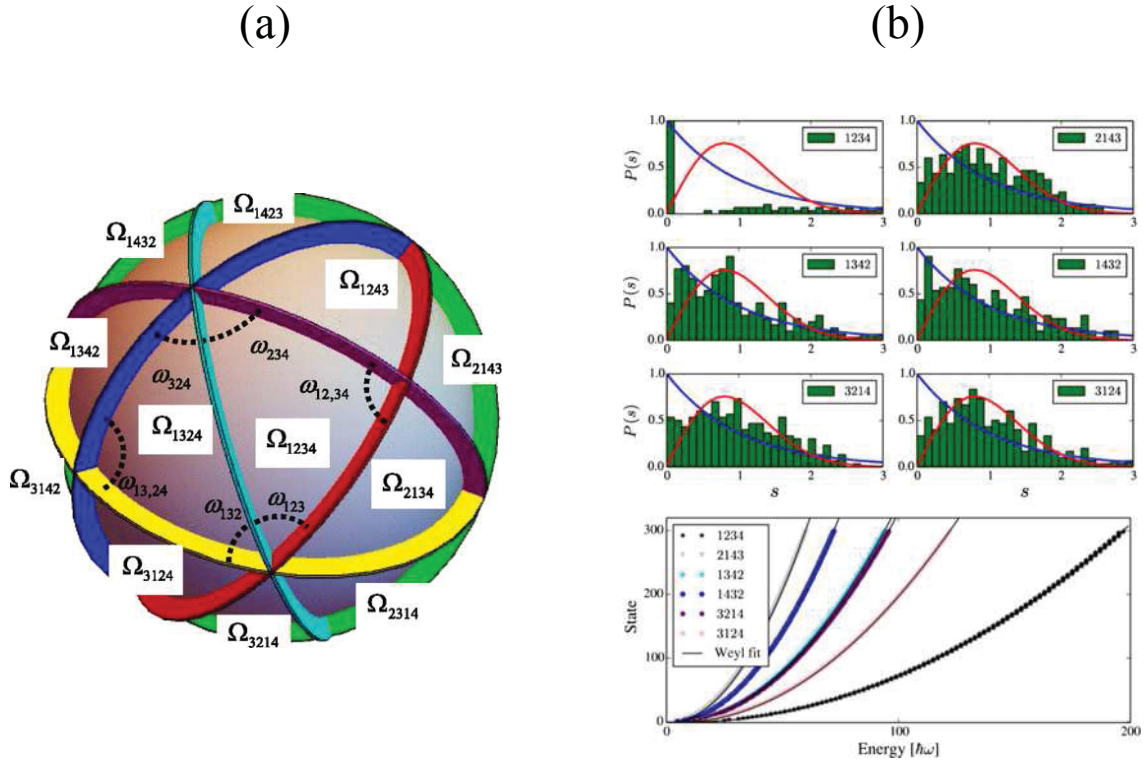


Figura 2.17: (a) Espaço de configuração para quatro partículas interagentes impenetráveis em uma armadilha harmônica. Ω_{1234} , etc., são as câmaras para uma disposição espacial específica das partículas e ω_{1234} são os ângulos entre os “espelhos”, o mesmo da Eq. (2.36). (b) Estatística de níveis de energia vizinhos $P(s)$ em função de s para cada uma das seis disposições possíveis associadas à simetria H_3 . Apenas a disposição $[[1234]]$ é Poisson, enquanto as demais disposições, a estatística é Wigner-Dyson (GOE). O gráfico logo abaixo mostra ótimo acordo com a lei de Weyl para os seis casos. Figuras extraídas de *Integrable Families of Hard-Core Particles with Unequal Masses in a One-Dimensional Harmonic Trap*, N. L. Harshman, Maxim Olshanii, A. S. Dehkharghani, A. G. Volosniev, Steven Glenn Jackson, and N. T. Zinner Phys. Rev. X 7, 041001 – 4 de outubro de 2017 (<https://doi.org/10.1103/PhysRevX.7.041001>).

Aliás, qualquer outra disposição diferente de $[[3126]]$ e $[[6213]]$, independentemente de como for gerada, não haverá nenhum grupo de reflexão possível e, conseqüentemente, nenhuma propriedade caleidoscópica; portanto, nenhuma função de onda por *Ansatz* de Bethe é possível. Tais disposições correspondem, possivelmente, a situações não integráveis. Esse resultado foi observado em um outro sistema, formado por muitas partículas interagentes por potenciais delta de Dirac, impenetráveis e confinadas em um potencial harmônico, cujo hamiltoniano [60] é

$$H = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{1}{2} m_i \omega^2 x_i^2 \right) + \lambda \sum_{i < j} \delta(x_i - x_j). \quad (2.38)$$

de um, corresponda às faces do outro e as arestas entre dois pares de vértices de um, corresponda às arestas entre dois pares de faces do outro.

Nesse caso, as câmaras que especificam as disposições das partículas estão em um espaço de configuração esférico (veja a Fig. 2.17(a)), e não mais em um espaço euclidiano, por causa da presença do potencial harmônico. Por conseguinte, funções de onda por *Ansatz* de Bethe como uma superposição finita de ondas planas não faz mais sentido, mas sim uma superposição finita de harmônicos esféricos. Procedendo-se de maneira análoga ao caso \tilde{F}_4 , obteve-se várias famílias integráveis de massas. Por exemplo, para quatro partículas, há três simetrias possíveis, A_3 (tetraédrica), C_3 (cúbica) e H_3 (icosaédrica) e, assim, há três famílias de massas integráveis em algumas câmaras do espaço de configuração. Para o caso particular da simetria H_3 , as massas são $m_1 = m_4 = 0,44279$, $m_2 = 0,03381$ e $m_3 = 0,08061$, com apenas seis setores diferentes e somente um deles é integrável, a disposição [1234]. As demais disposições são quanticamente não integráveis, como verificado pelo espectro dos níveis de energias próximos, sendo do tipo Wigner-Dyson (GOE), e não Poisson (veja a Fig. 2.17(b)) [60].

Portanto, na perspectiva de Grupos de Reflexão, o *Ansatz* de Bethe para sistemas de partículas de massas diferentes somente é possível quando elas forem impenetráveis.

Aspectos Essenciais da Dinâmica Clássica

Para o estudo do nosso problema quântico, partimos da análise clássica do sistema para determinarmos como os momentos lineares das partículas são gerados; isso é importante porque saberemos sob quais condições um conjunto finito de pares de momentos lineares é gerado para, em seguida, associarmos cada um deles a uma onda plana. A superposição desse conjunto finito de ondas planas vai nos conduzir a uma expressão para a função de onda desejada. Parte dos resultados presentes foram obtidos da dissertação de mestrado [66].

3.1 O Sistema Clássico de Duas Partículas em uma Caixa 1D Finita

O nosso sistema clássico consiste de duas partículas pontuais, de massas quaisquer, confinadas em um intervalo 1D finito de comprimento L (caixa 1D), colidindo elasticamente entre si e com as paredes (veja a Fig. 3.1(a)). Entre duas colisões consecutivas quaisquer, as partículas têm movimento uniforme.

Denotemos a partícula à esquerda por **1** e a partícula à direita, por **2**. Para a i -ésima partícula, com $i \in \{1, 2\}$, considere q_i a posição, p_i o momento linear, m_i a massa e λ a intensidade do potencial de interação $V(q_1, q_2)$. Dessa forma, o hamiltoniano $\mathcal{H}(q_1, q_2, p_1, p_2)$ desse sistema é [166]

$$\mathcal{H}(q_1, q_2, p_1, p_2) = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + \lambda[\delta(q_1) + \delta(q_1 - q_2) + \delta(q_2 - L)], \quad \text{com } \lambda \rightarrow \infty. \quad (3.1)$$

Observe que o potencial de interação $V(q_1, q_2) = \lambda[\delta(q_1) + \delta(q_1 - q_2) + \delta(q_2 - L)]$ tem três

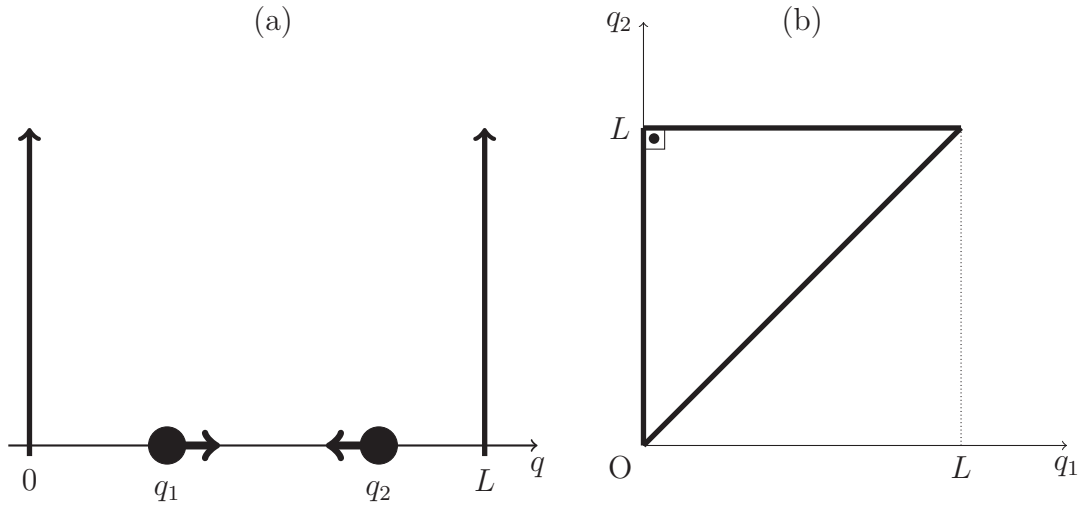


Figura 3.1: (a) Sistema de duas partículas quaisquer confinadas em uma região de comprimento L . (b) Espaço de configuração \mathbf{C}^2 correspondente.

partes:

$$V_1(q_1, q_2) = \lambda\delta(q_1), \quad V_2(q_1, q_2) = \lambda\delta(q_2 - L),$$

que descrevem as colisões partícula-parede (p-w) da partícula **1** em $q_1 = 0$ e da partícula **2** em $q_2 = L$, respectivamente, e

$$V_3(q_1, q_2) = \lambda\delta(q_1 - q_2),$$

que descreve a colisão partícula-partícula (p-p) entre a **1** e a **2**. Além disso, a intensidade λ do potencial de interação deve ser infinita, a fim de garantir a impenetrabilidade das partículas clássicas nas colisões p-p e p-w.

O hamiltoniano $\mathcal{H}(q_1, q_2, p_1, p_2)$ se reduz à energia puramente cinética sempre que $q_1 \neq 0$, $q_2 \neq L$ e $q_1 \neq q_2$,

$$E = \frac{m_1 v_1^2}{2} + \frac{m_2 v_2^2}{2}, \quad (3.2)$$

em que $p_i = m_i v_i$, ou seja, as partículas têm movimento livre entre colisões subsequentes. Nas colisões p-w, as velocidades trocam apenas de sinal; já nas colisões p-p, há uma troca de velocidades de acordo com a conservação de energia e de momento das duas partículas. Como resultado, se obtém uma equação matricial das velocidades depois, v_{id} , em função das velocidades antes [167], v_{ia} ,

$$\begin{bmatrix} v_{1d} \\ v_{2d} \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \frac{1-\gamma}{1+\gamma} & \frac{2\gamma}{1+\gamma} \\ \frac{2}{1+\gamma} & \frac{\gamma-1}{1+\gamma} \end{bmatrix}}_{\mathbf{M}(\gamma)} \begin{bmatrix} v_{1a} \\ v_{2a} \end{bmatrix}, \quad (3.3)$$

em que $\gamma = \frac{m_2}{m_1}$ é a razão das massas das partículas e $\mathbf{M}(\gamma)$ é a matriz que transforma as velocidades iniciais nas finais. A Eq. (3.2) mostra que as velocidades, ou momentos, gerados nas colisões p-w e p-p pertencem a uma elipse. Em vista disso, denominamos esses pares de velocidades e de momentos lineares de *estados* e o espaço correspondente, a elipse, de espaço de estados [168].

3.2 A Correspondência entre o Sistema de Duas Partículas na Caixa 1D e o Bilhar Triângulo Retângulo

O sistema de duas partículas interagentes confinadas em uma caixa 1D equivale a um sistema 2D em forma de um triângulo retângulo, que confina uma única partícula colidindo especularmente em sua fronteira (bilhar triângulo retângulo). Para mostrar essa equivalência, precisamos determinar primeiramente o espaço de configuração \mathbf{C}^2 do sistema original. Observe que:

- as posições q_i das partículas estão restritas ao intervalo de comprimento L , $q_i \in [0, L]$;
- as partículas são impenetráveis, $0 \leq q_1 \leq q_2 \leq L$;
- as colisões p-p ocorrem em $q_1 = q_2$;
- as colisões p-w das partículas **1** e **2** ocorrem nos intervalos $[0, q_2)$ e $(q_1, L]$, respectivamente.

Dessa forma, o espaço de configuração \mathbf{C}^2 é a região triangular destacada na Fig. 3.1(b). No entanto, não podemos interpretar essa região triangular como o nosso bilhar, pois uma partícula incidindo na hipotenusa, não é refletida especularmente em geral, de acordo com a Eq. (3.3) (veja o **Apêndice D** para essa demonstração). A reflexão especular na hipotenusa, para quaisquer valores de massas, é possível apenas com a aplicação da transformação canônica¹

$$x_i = q_i \sqrt{m_i}, \quad P_i = \frac{p_i}{\sqrt{2m_i}}, \quad (3.4)$$

¹Transformações canônicas são transformações de coordenadas e momentos de tal maneira que as equações de Hamilton são preservadas (veja o **Apêndice A**).

no hamiltoniano da Eq. (3.1) [94, 166], dando

$$\hat{\mathcal{H}}(x_1, x_2, P_1, P_2) = P_1^2 + P_2^2 + \lambda[\sqrt{m_1}\delta(x_1) + \sqrt{m_2}\delta(\sqrt{\gamma}x_1 - x_2) + \sqrt{m_2}\delta(x_2 - \sqrt{m_2}L)]. \quad (3.5)$$

Temos, então, um novo espaço de configuração $\hat{\mathbf{C}}^2$ em forma de triângulo retângulo, cujos lados são tais que $0 \leq x_1 \leq \sqrt{m_1}L$, $0 \leq x_2 \leq \sqrt{m_2}L$ e $x_1 \leq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}}$. Desse modo, a forma do triângulo retângulo fica associada diretamente às massas das partículas, como mostra a Fig. 3.2(a). Isso é importante por explicitar quais bilhares são integráveis e quais não são [66].

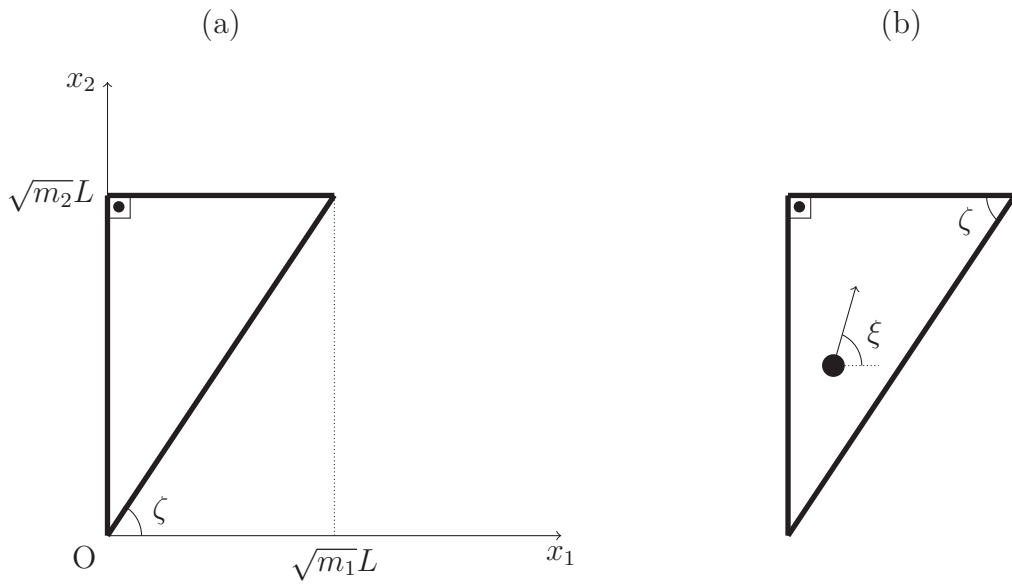


Figura 3.2: (a) Espaço de configuração $\hat{\mathbf{C}}^2$ correspondente ao hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}(x_1, x_2, P_1, P_2)$; (b) Bilhar triângulo retângulo correspondente ao espaço de configuração $\hat{\mathbf{C}}^2$: em seu interior, uma partícula de massa unitária, movendo-se com velocidade de módulo \sqrt{E} , é refletida sempre que ela colidir com um dos lados do bilhar. O ângulo ξ estabelece a direção de movimento da partícula e o ângulo ζ está relacionado às massas das duas partículas, $\tan \zeta = \sqrt{\gamma}$.

A transformação canônica que define o momento linear P_i leva a uma indistinção entre momento linear e velocidade da partícula: sendo $p_i = m_i v_i$, obtemos $P_i = \frac{v_i}{\sqrt{2m_i^{-1}}}$. Por outro lado, podemos definir na Eq. (3.2) a velocidade $w_i = \frac{v_i}{\sqrt{2m_i^{-1}}}$ normalizada a \sqrt{E} . Portanto, $P_i = w_i$, justificando a denominação de “estado” tanto para os pares de momentos, quanto para os pares de velocidades das partículas. Consequentemente, a Eq. (3.2) torna-se

$$E = w_1^2 + w_2^2, \quad (3.6)$$

ou seja, o espaço de estados é uma circunferência de raio \sqrt{E} .

Usando $v_i = \sqrt{2m_i^{-1}}w_i$ na Eq. (3.3), o estado depois de uma colisão p-p é a reflexão por um ângulo θ do estado antes dessa colisão,

$$\begin{bmatrix} w_{1d} \\ w_{2d} \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{bmatrix}}_{R_f(\theta)} \begin{bmatrix} w_{1a} \\ w_{2a} \end{bmatrix}, \quad (3.7)$$

em que

$$\cos \theta = \frac{1 - \gamma}{1 + \gamma}, \quad \theta \in (0, \pi), \quad (3.8)$$

e $R_f(\theta)$ é a matriz de reflexão. Essa matriz tem a propriedade desejada de reflexão especular na hipotenusa, conforme a demonstração no **Apêndice D**. A reflexão especular também é preservada nas colisões p-w, pois os sinais das velocidades w_i são apenas trocadas. Além de garantir a reflexão especular, precisamos estabelecer uma relação entre o ângulo θ e o ângulo ζ das Figs. 3.2. Para isso, usamos as relações trigonométricas $\sin^2 \frac{\theta}{2} = \frac{1 - \cos \theta}{2}$ e $\cos^2 \frac{\theta}{2} = \frac{1 + \cos \theta}{2}$ na Eq. (3.8), dando

$$\gamma = \tan^2 \frac{\theta}{2}. \quad (3.9)$$

Pela Fig. 3.2(a), vemos que $\gamma = \tan^2 \zeta$. Logo, segue-se da comparação com a Eq. (3.9) que $\zeta = \frac{\theta}{2}$. Dessa forma, conseguimos estabelecer todos os vínculos para interpretarmos a Eq. (3.5) como o hamiltoniano de uma única partícula, com massa unitária, movendo-se com velocidade de módulo \sqrt{E} e confinada em um bilhar triângulo retângulo, Fig. 3.2(b).

A reflexão de um estado por um ângulo θ dada pela Eq. (3.7) pode ser reinterpretada. Considere, por exemplo, o estado (w_{1a}, w_{2a}) antes da colisão p-p no 4º quadrante, em que $w_{1a} > 0$ e $w_{2a} < 0$; então, o estado (w_{1d}, w_{2d}) depois da colisão p-p pode ser obtido pela reflexão do estado (w_{1a}, w_{2a}) em relação ao eixo w_1 , seguida por uma rotação anti-horária por um ângulo θ , conforme ilustrada nas Figs. 3.3(a)-(c). Isso significa que, efetivamente, o estado final é a rotação $R_t(\theta)$ do estado $(w_{1a}, -w_{2a})$,

$$\begin{bmatrix} w_{1d} \\ w_{2d} \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}}_{R_t(\theta)} \begin{bmatrix} w_{1a} \\ -w_{2a} \end{bmatrix}. \quad (3.10)$$

Essa interpretação se mantém para quaisquer outros estados no 1º e 3º quadrantes que conduzam a uma colisão p-p.

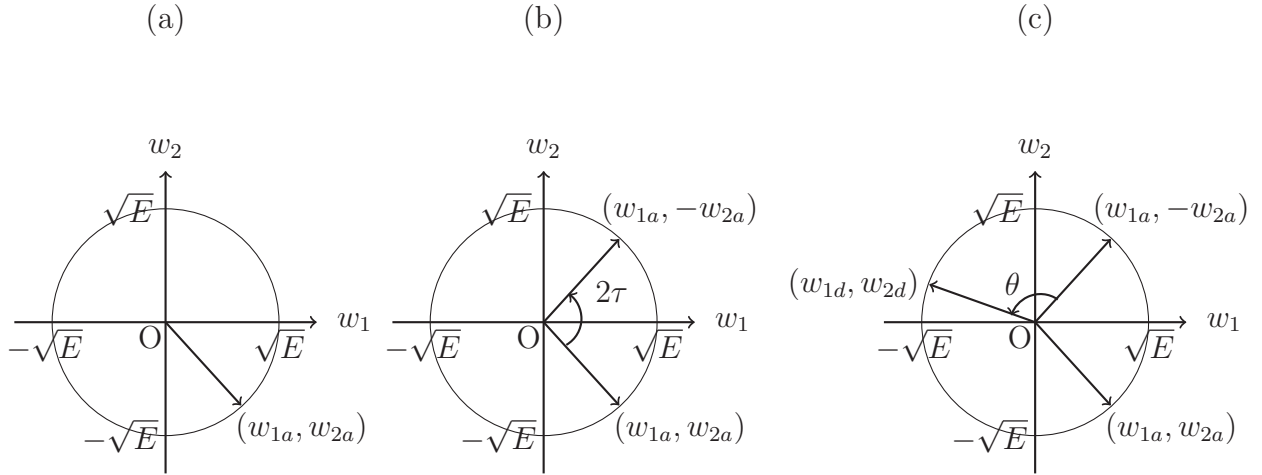


Figura 3.3: Etapas para a geração de um estado: (a) estado inicial (w_{1a}, w_{2a}) ; (b) reflexão do estado (w_{1a}, w_{2a}) em relação ao eixo w_1 , que é equivalente a uma rotação por um ângulo 2τ , em que τ é o ângulo em relação a w_1 do vetor associado a (w_{1a}, w_{2a}) ; (c) rotação anti-horária do estado $(w_{1a}, -w_{2a})$ por um ângulo θ , gerando o estado final (w_{1d}, w_{2d}) .

3.3 Estados Interpretados como Números Complexos

Lembrando que o plano real e o conjunto dos números complexos são espaços vetoriais isomorfos [169], podemos associar cada estado antes e depois de uma colisão p-p a um número complexo $z_a = w_{1a} + iw_{2a}$ e $z_d = w_{1d} + iw_{2d}$ de módulo \sqrt{E} e a matriz $R_t(\theta)$, a $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$; assim, a equação complexa equivalente a Eq. (3.10) é

$$z_d = e^{i\theta} \bar{z}_a, \quad (3.11)$$

em que a barra sobre o número complexo denota a conjugação complexa. As colisões p-w também podem ser descritas com a notação complexa:

(i) Colisão da **1** com a parede em $q_1 = 0$:

$$z_d = -\bar{z}_a = -w_{1a} + iw_{2a}. \quad (3.12)$$

(ii) Colisão da **2** com a parede em $q_2 = L$:

$$z_d = \bar{z}_a = w_{1a} - iw_{2a}. \quad (3.13)$$

(iii) Colisão da **1** e da **2** com as paredes em $q_1 = 0$ e $q_2 = L$ (não necessariamente ao mesmo tempo), respectivamente:

$$z_d = -z_a = -w_{1a} - iw_{2a}. \quad (3.14)$$

Perceba que a notação dos estados por números complexos é mais simples que a matricial. Além disso, esta notação é vantajosa em relação à matricial na determinação analítica dos estados possíveis gerados em uma sucessão de colisões p-p e p-w, pois é mais fácil multiplicar números complexos na forma polar do que multiplicar matrizes, conforme mostrada para uma sequência particular de colisões no **Apêndice E**. Em vista disso, adotaremos daqui em diante a notação complexa para os estados gerados pelo sistema sempre que for conveniente.

Como visto acima, os estados devido às colisões p-w são gerados por conjugação complexa e por rotação de um ângulo π . Isso mostra que não é possível obtê-los pela rotação de um estado \bar{z}_a imediatamente antes de uma colisão p-p. Então, precisamos incluí-los também como estados z_d a serem rotacionados por um ângulo θ para se ter todos os estados possíveis do nosso sistema: sendo $Z_d = e^{i\theta}\bar{Z}_a$ a equação análoga à Eq. (3.11), e $Z_a = z_d$ o estado antes da colisão p-p, com z_d dado pelas Eqs. (3.12)-(3.14), obtemos para:

$$(I) \quad Z_a = -\bar{z}_a,$$

$$Z_d = -e^{i\theta} z_a; \quad (3.15)$$

$$(II) \quad Z_a = \bar{z}_a,$$

$$Z_d = e^{i\theta} z_a; \quad (3.16)$$

$$(III) \quad Z_a = -z_a,$$

$$Z_d = -e^{i\theta} \bar{z}_a. \quad (3.17)$$

Observando as semelhanças entre as Eqs. (3.15) e (3.16) e das Eqs. (3.11) e (3.17), podemos reuni-las como

$$z_d = \pm e^{i\theta} \bar{z}_a, \quad (3.18a)$$

$$Z_d = \pm e^{i\theta} z_a. \quad (3.18b)$$

A sucessão de colisões p-p e p-w leva à iteração de rotações como descritas pelas Eqs. (3.18a) e (3.18b), de modo que, para alguma l -ésima iteração, se tenha

$$z_l = \pm e^{il\theta} \bar{z}_0, \quad (3.19a)$$

$$Z_l = \pm e^{il\theta} z_0, \quad (3.19b)$$

com $l > 0$ inteiro. Assim, temos quatro equações geradoras dos estados possíveis do sistema por meio de rotações por θ . Quando esse ângulo for tal que:

- $\frac{\theta}{\pi}$ é irracional, o sistema seria ergódico se nos restringíssemos simplesmente ao fato de

serem rotações por ângulos $\frac{\theta}{\pi}$ irracionais [170–174]. No entanto, essa condição é apenas necessária, e não suficiente, pois a dinâmica do sistema permanece acessando as mesmas classes de trajetórias do espaço de fases, como mostrado em [66]. Uma demonstração da ergodicidade desse sistema clássico ainda é um problema em aberto;

- $\frac{\theta}{\pi}$ é racional. Isso significa que o ângulo $\theta = \frac{m\pi}{n}$, para $m > 0$ e $n > 1$ inteiros coprimos. Esse caso é importante na investigação da versão quântica do sistema. Há duas situações:

- ★ $m = 1$: pelas Eqs. (3.19a) e (3.19b), temos $\pm e^{l\frac{\pi}{n}}$, com $l \in [1, 2n]$; assim, para cada $l > n$, temos $e^{l\frac{\pi}{n}} = -e^{lj\frac{\pi}{n}}$, com $j \in [1, n]$ inteiro. Logo, é suficiente considerar apenas o sinal positivo nas Eqs. (3.19a) e (3.19b),

$$z_l = e^{l\frac{\pi}{n}} \bar{z}_0, \quad (3.20a)$$

$$Z_l = e^{l\frac{\pi}{n}} z_0, \quad (3.20b)$$

pois são gerados os mesmos estados para o sinal negativo. Consequentemente, cada uma dessas rotações distribuem os estados por um ângulo $\theta = \frac{\pi}{n}$ no espaço de estados.

- ★ $m \neq 1$: nesse caso, m pode ser par ou ímpar. Sendo par, $+e^{l\frac{m\pi}{n}}$ corresponde a rotações sucessivas por ângulos pares, gerando-se apenas a metade dos estados possíveis. A outra metade é gerada por $-e^{l\frac{m\pi}{n}} = e^{i(-1+l\frac{m}{n})\pi}$, com $e^{-i\pi} = -1$, ou seja, são rotações sucessivas por ângulos ímpares. Restringindo os ângulos $l\frac{m\pi}{n}$ e $(-1+l\frac{m}{n})\pi$ ao intervalo $(0, 2\pi]$, obtemos uma sequência de rotações por ângulos pares e outra de rotações por ângulos ímpares a partir de um ângulo $\frac{\pi}{n}$, pertencente ao 1º quadrante,

$$+e^{l\frac{m\pi}{n}} = e^{i2j\frac{\pi}{n}} \quad \text{e} \quad -e^{l\frac{m\pi}{n}} = e^{i(2j-1)\frac{\pi}{n}},$$

com $j \in [1, n]$ inteiro.

Reunindo essas duas sequências, de maneira que as rotações $+e^{l\frac{m\pi}{n}}$ e $-e^{l\frac{m\pi}{n}}$ sejam simplesmente l -rotações por $\frac{\pi}{n}$, $e^{l\frac{\pi}{n}}$, com $l \in [1, 2n]$, obtemos novamente uma distribuição de estados por um ângulo $\frac{\pi}{n}$ (veja a Fig. 3.4(a)). O mesmo resultado é obtido para m ímpar.

Portanto, para $\theta = \frac{m\pi}{n}$ arbitrário, qualquer estado possível do nosso sistema físico é gerado por reflexões ou rotações sucessivas de um estado z_0 , conforme as Eqs. (3.20a) e (3.20b). Essas sucessões de reflexões e de rotações não correspondem à sequência temporal de colisões das partículas, pois ela depende das condições iniciais de posição e momento escolhidas.

Os pares de estados z_l e Z_l também estão igualmente distribuídos no espaço de estados (veja a Fig. 3.4(a)). Para se mostrar isso, note que a relação entre z_0 e seu complexo

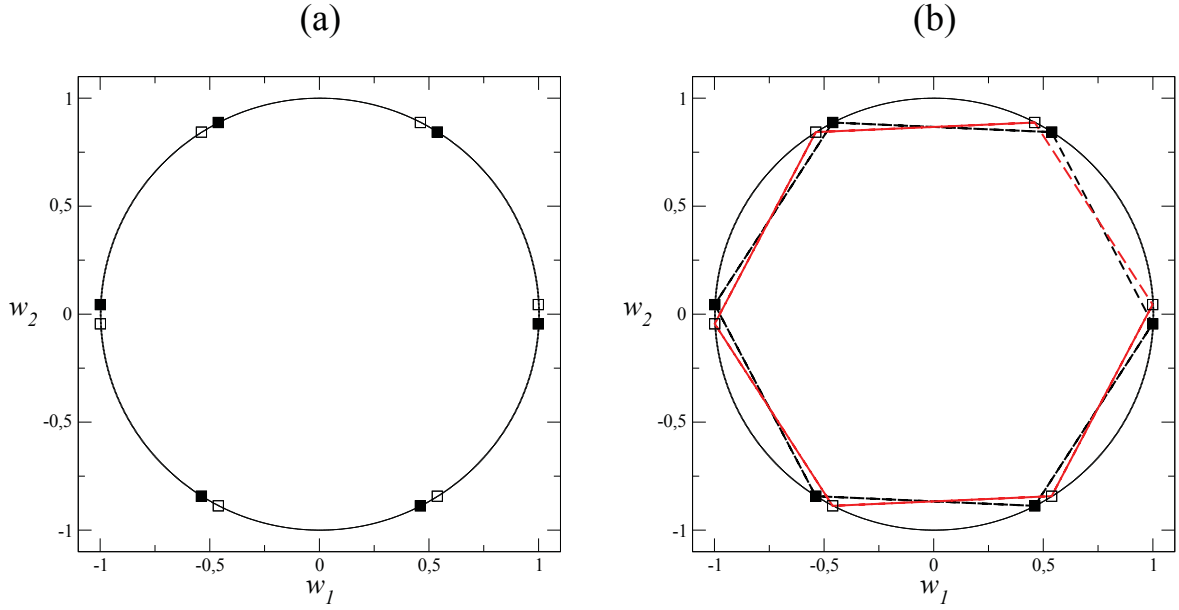


Figura 3.4: Ilustração do espaço de estados unitário para o caso $\gamma = 3$ ($\theta = \frac{2\pi}{3}$) gerado pela Eq. (3.20a), indicado por ■, e pela Eq. (3.20b), indicado por □. Como $n = 3$, o número total de estados é $N_{es} = 12$. (a) Distribuição dos estados ■, □, assim como seus pares defasados por $f_1(l) \approx 0$, segundo o ângulo $\frac{\pi}{3}$. (b) Hexágonos regulares destacam a estrutura de Grupo Diedral dos conjuntos de estados.

conjugado é

$$\bar{z}_0 = e^{i2\tau} z_0, \quad (3.21)$$

em que $2\tau \in (0, \pi)$ é o ângulo entre \bar{z}_0 e z_0 (veja a Fig. 3.5(a)), ou seja, é um ângulo constante; substituindo na Eq. (3.20a), a razão de z_l em relação a Z_l também é constante,

$$\frac{z_l}{Z_l} = e^{i2\tau},$$

ou seja, os pares de estados z_l e Z_l possuem uma defasagem constante entre eles de 2τ (veja as Figs. 3.5(a)-(b) ilustrando o caso $l = 1$) e, assim, uma distribuição geralmente distinta daquela de $\frac{\pi}{n} \in (0, \frac{\pi}{2}]$ dos estados z_l e Z_l . Por conseguinte, surge outro ângulo de defasagem $f_1(l) = l\frac{\pi}{n} - 2\tau$ entre Z_l e \bar{z}_0 , como podemos obter pela relação entre a Eq. (3.20b) e a Eq. (3.21),

$$\frac{Z_l}{\bar{z}_0} = e^{i(l\frac{\pi}{n} - 2\tau)}.$$

Há dois resultados possíveis: se a defasagem $f_1(l) \approx 0$ para algum inteiro $l = r$ fixo, então os estados Z_l e \bar{z}_0 estarão próximos entre si; caso contrário, esses estados estarão distantes; no entanto, como a versão contínua do ângulo de defasagem, $f_1(x) = x\frac{\pi}{n} - 2\tau$, sempre tem uma raiz, isso significa que, variando-se os valores de l , garante-se que exista um $l \neq r$ no qual $f_1(l) \approx 0$. Como isso fora feito para um estado inicial z_0 , repetimos esse procedimento para os demais estados z_l , usando-o para se definir um novo estado inicial

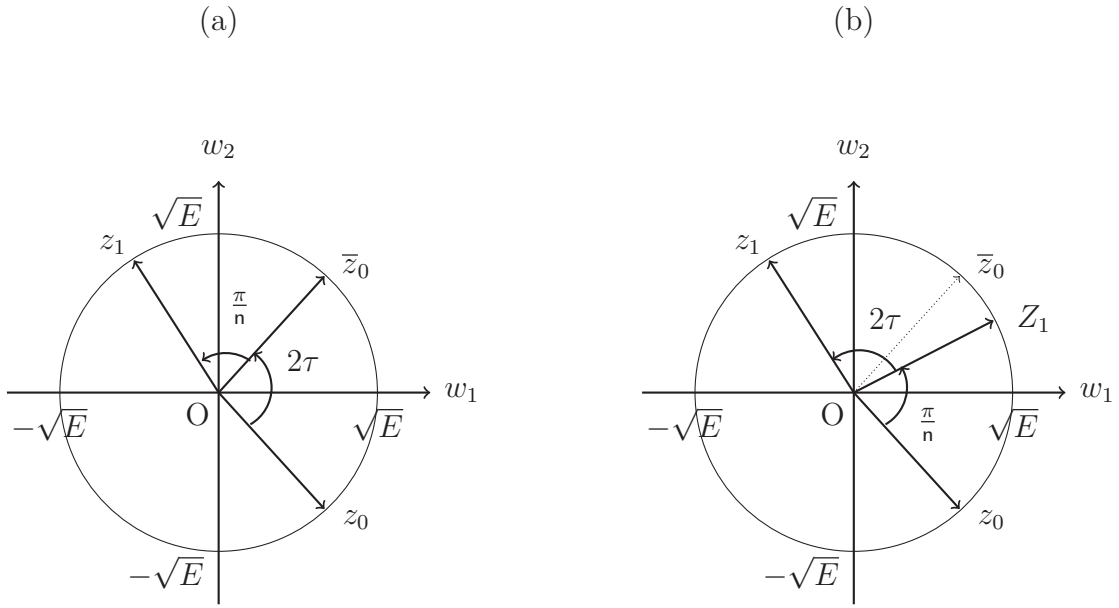


Figura 3.5: Defasagem entre os estados z_l e Z_l para o caso particular $l = 1$: (a) dado um estado inicial z_0 , o estado z_1 é obtido pela reflexão em relação ao eixo w_1 , ou uma rotação por um ângulo 2τ , seguido de uma rotação por um ângulo $\frac{\pi}{n}$; (b) rotacionando z_0 por um ângulo $\frac{\pi}{n}$, obtemos o estado Z_1 . Esse estado está defasado de 2τ do estado z_1 . Além disso, os estados \bar{z}_0 e Z_1 estão defasados de $(l\frac{\pi}{n} - 2\tau)$.

z_0 . Ao final, teremos pares de estados z_l e $Z_{l'}$, com $l, l' \in [1, 2n]$, distribuídos no espaço de estados segundo um ângulo médio $\frac{\pi}{n}$, uma vez que os estados consecutivos z_l e $Z_{l'}$ já estão assim distribuídos.

As Eqs. (3.20a) e (3.20b) são rotações $e^{il\frac{\pi}{n}}$ de z_0 e \bar{z}_0 , em que $l \in [1, 2n]$. Isso significa que cada uma dessas equações gera um conjunto de $2n$ estados, ou seja, o número total de estados que o sistema pode gerar é $N_{es} = 4n$. Esses estados possuem a estrutura do Grupo Diedral [128] (veja a Fig. 3.4(b)), um grupo multiplicativo cíclico (**Apêndice B**). Como a distribuição dos estados z_l e Z_l é uniforme e por ângulos $\frac{\pi}{n}$, o número médio de estados por quadrante é $N_q = \frac{N_{es}}{4} = n$. A Fig. 3.6 mostra os espaços de estados obtidos numericamente [66] para cada valor de γ , corroborando tanto a distribuição quanto o número de estados. Podemos atribuir um significado físico a esse resultado: como o 1º quadrante corresponde às velocidades das partículas com sinais opostos, em que a 1 tem velocidade positiva e a 2 tem velocidade negativa, isso significa que o inteiro n , determinada pela razão de massas γ , é o número de pares de velocidades opostos que sempre levam a uma colisão p-p.

A quantidade de pontos no espaço de estados gerados por um certo número de colisões p-p é insuficiente para se concluir algo sobre a integrabilidade do sistema. Isso está ilustrado nos espaços de estados das Figs. 3.6(h) e (i): realizando numericamente 1 milhão de

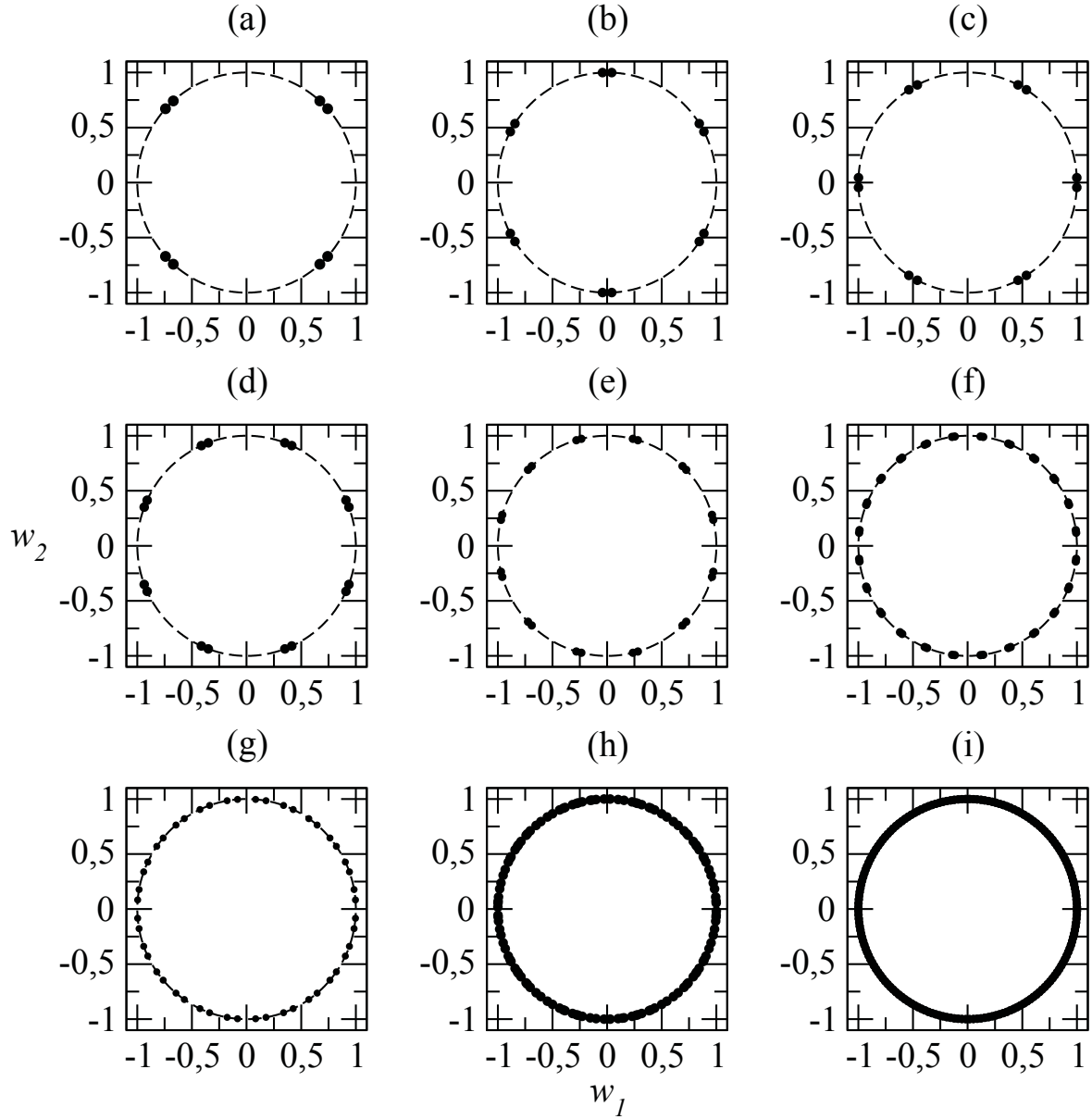


Figura 3.6: Espaços de estados para: (a) $\gamma = 1$, $\theta = \frac{\pi}{2}$ (90°), $N_{es} = 8$; (b) $\gamma = \frac{1}{3}$, $\theta = \frac{\pi}{3}$ (60°), $N_{es} = 12$; (c) $\gamma = 3$, $\theta = \frac{2\pi}{3}$ (120°), $N_{es} = 12$; (d) $\gamma = \frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}+1}$, $\theta = \frac{\pi}{4}$ (45°), $N_{es} = 16$; (e) $\gamma = \frac{2-\sqrt{3}}{2+\sqrt{3}}$, $\theta = \frac{\pi}{6}$ (30°), $N_{es} = 24$; (f) $\gamma = \frac{4-\sqrt{6}-\sqrt{2}}{4+\sqrt{6}+\sqrt{2}}$, $\theta = \frac{\pi}{12}$ (15°), $N_{es} = 48$; (g) $\gamma = \frac{4-\sqrt{6}+\sqrt{2}}{4+\sqrt{6}-\sqrt{2}}$, $\theta = \frac{5\pi}{12}$ (75°), $N_{es} = 48$; (h) $\gamma = \frac{1}{2}$, $\theta = 1,2309594\dots$ ($70,528779\dots^\circ$), $N_{es} = 128$; (i) $\gamma = \frac{1-\cos\frac{\pi}{90}}{1+\cos\frac{\pi}{90}}$, $\theta = \frac{\pi}{90}$ (2°), $N_{es} = 360$.

colisões p-p, gerou-se 128 estados para a razão de massas $\gamma = \frac{1}{2}$, que é o caso “ergódico”² e de *genus* infinito [98] (veja a Fig. 3.6(i)), enquanto para $\gamma = \frac{1-\cos\frac{\pi}{90}}{1+\cos\frac{\pi}{90}}$, que é um caso pseudointegrável de *genus* igual a 45, gerou-se 360 estados. Para se observar qualitativamente a diferença entre um caso “ergódico” e um caso integrável/pseudointegrável, usamos, por exemplo, o espaço de fases do momento p_1 e da posição x_1 da partícula 1 sempre que ela

²Usou-se “ergódico” e não ergódico, pois esses casos carecem de uma prova rigorosa quanto a essa propriedade [66, 175].

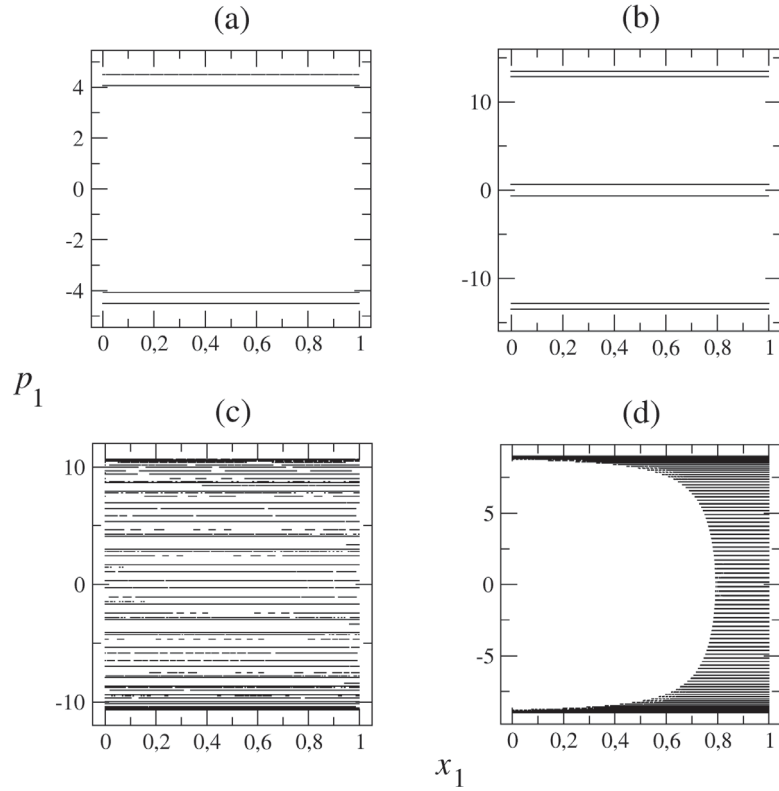


Figura 3.7: Espaços de fases para: (a) $\gamma = 1$; (b) $\gamma = \frac{1}{3}$; (c) $\gamma = \frac{1}{2}$ (ergódico); (d) $\gamma = \frac{1-\cos \frac{\pi}{90}}{1+\cos \frac{\pi}{90}}$. Enquanto os casos não ergódicos apresentam um acúmulo de pontos em linhas bem definidas, o caso “ergódico” exibe uma “difusão” pelo espaço de fases.

colidir com a parede em $x_1 = 0$ ou com a partícula **2**. Assim, fazendo um experimento numérico com 2 milhões de colisões p-p e p-w para quatro razões de massas, $\gamma = 1$, $\gamma = \frac{1}{3}$, $\gamma = \frac{1}{2}$ e $\gamma = \frac{1-\cos \frac{\pi}{90}}{1+\cos \frac{\pi}{90}}$, obtemos o espaço de fases da Fig. 3.7. Observe que os casos integrável/pseudointegrável, Figs. 3.7(a), (b) e (d), acumulam pontos (x_1, p_1) em linhas bem definidas, indicando que a partícula no bilhar visita apenas regiões específicas; por outro lado, o caso “ergódico” $\gamma = \frac{1}{2}$ não exibe esse acúmulo de pontos, mas uma “difusão” de (x_1, p_1) pelo espaço de fases, Fig. 3.7(c).

3.4 O Conjunto de Estados e suas Propriedades

A geração de estados pelo sistema físico é bastante simples, pois depende apenas de duas equações, Eqs. (3.20a) e (3.20b), constituindo um conjunto \mathbb{E} com $4n$ elementos,

$$\mathbb{E} = \{z_1, \dots, z_n, z_{n+1}, \dots, z_{2n}, Z_1, \dots, Z_n, Z_{n+1}, \dots, Z_{2n}\} := \{z_l, Z_l\}_{1 \leq l \leq 2n}.$$

Dessa forma, possíveis aplicações que exigem conhecer explicitamente todos os estados possíveis seria dificultoso para valores crescentes de n . No entanto, lembrando que esses estados formam um Grupo Diedral, a sua estrutura provém propriedades que simplificam a representação dos estados, que será importante para a análise quântica. São elas:

1. **Simetria:** Sejam $z_{l'} = e^{i l' \frac{\pi}{n}} \bar{z}_0$ e $Z_{l'} = e^{i l' \frac{\pi}{n}} z_0$. Se $l' > n$, existe um inteiro l tal que $z_{l'} = -z_l$ e $Z_{l'} = -Z_l$. Tais relações são únicas no intervalo $(0, 2\pi]$.
2. **Relação entre os estados “ z ” e “ Z ”:** Sejam $z_j = e^{i j \frac{\pi}{n}} \bar{z}_0$ e $Z_l = e^{i l \frac{\pi}{n}} z_0$.
 - (a) Se $j + l = n$, temos $Z_l = -\bar{z}_{n-l}$.
 - (b) Se $j + l = 2n$, temos $Z_l = \bar{z}_{2n-l}$.
3. **Relação entre os estados antes e depois de uma colisão p-p:**
 - (a) Seja $z_l = e^{i l \frac{\pi}{n}} \bar{z}_0$ um estado imediatamente antes de uma colisão p-p. Então, o estado depois dessa colisão é

$$e^{i \frac{m\pi}{n}} \bar{z}_l = Z_{2n+m-l}. \quad (3.22)$$

A Eq. (3.22) permanece válida se o estado “ Z ” for o estado imediatamente antes e “ z ” for o imediatamente depois de uma colisão p-p. Para se mostrar isso, basta multiplicar o complexo conjugado da Eq. (3.22) por $e^{i \frac{m\pi}{n}}$ e definir $2n + m - l = l'$, dando

$$e^{i \frac{m\pi}{n}} \bar{Z}_{l'} = z_{2n+m-l'}.$$

Isso acontece porque esses estados constituem um grupo cíclico, como manifestado pela soma constante dos seus índices,

$$l + (2n + m - l) = 2n + m.$$

Em vista disso, chamamos o par de estados z_l e Z_{2n+m-l} de *par de estados antes-depois de uma colisão p-p*, sem a necessidade de se identificar qual estado é o antes ou qual é o depois de uma colisão p-p.

(b) Seja o par de estados z_l e Z_{2n+m-l} . Pela propriedade (a) do item 2, o par de estados antes-depois de uma colisão p-p pode ser escrito como $C(z_l) = -\bar{z}_{n-m+l}$.

É conveniente definirmos o estado inicial z_0 tal que $z_1 = \alpha^{(1)} + i\beta^{(1)} = \alpha + i\beta$, em que $0 < \beta < \alpha$,

$$z_0 = \alpha \cos \frac{\pi}{n} + \beta \sin \frac{\pi}{n} + i \left(\alpha \sin \frac{\pi}{n} - \beta \cos \frac{\pi}{n} \right),$$

e juntamente com as propriedades acima, podemos escrever uma lista dos estados possíveis

$$\begin{cases} z_l = \alpha^{(l)} + i\beta^{(l)}, & l \in [1, n-1] \\ z_l = -\alpha^{(l)} + i\beta^{(l)}, & l = n \\ z_{l'} = -z_l = -\alpha^{(l)} - i\beta^{(l)}, & l' \in [n+1, 2n-1] \\ z_{l'} = \bar{z}_0 = \alpha^{(l)} - i\beta^{(l)}, & l' = 2n \end{cases}, \quad (3.23)$$

$$\begin{cases} Z_l = -\alpha^{(n-l)} + i\beta^{(n-l)} = -\bar{z}_{n-l}, & l \in [1, n-1] \\ Z_l = -\alpha^{(l)} - i\beta^{(l)} = -z_0, & l = n \\ Z_{l'} = -Z_l = \alpha^{(n-l)} - i\beta^{(n-l)}, & l' \in [n+1, 2n-1] \\ Z_{l'} = z_0 = \alpha^{(l)} + i\beta^{(l)}, & l' = 2n \end{cases}, \quad (3.24)$$

o que não representa nenhuma restrição, pois esses estados constituem um grupo cíclico e, por isso, uma definição diferente do estado inicial implicará em uma lista dos mesmos estados em uma ordem diferente.

As Eqs. (3.23) e (3.24) mostram que basta o conhecimento de n estados para determinarmos os demais possíveis. Note também que o estado $z_l = z_n$ tem a sua parte real com sinal oposto ao dos estados que o antecedem. Por isso, temos uma análise à parte:

- O caso $l \in [1, n-1]$. Para o par de estados antes-depois de uma colisão p-p $C(z_l) = -\bar{z}_{n-m+l}$, temos $n-m+l \leq n$, o que dá $l \leq m$, ou seja, o inteiro m limita os valores de l a estados $-\bar{z}_{n-m+l} = -\alpha^{(n-m+l)} + i\beta^{(n-m+l)}$. Por conseguinte, quando $l > m$, temos $n-m+l > n$. Logo, é preciso restringir $n-m+l$ ao inteiro n , que é o mesmo que multiplicar as equações geradoras de estados por $e^{2n\frac{\pi}{n}} = -1$, resultando em $C(z_l) = \bar{z}_{l-m} = \alpha^{(l-m)} + i\beta^{(l-m)}$.
- O caso $l = n$. Considere $z_n = -\alpha^{(n)} + i\beta^{(n)} = -\bar{z}_0$; como $n = l > m$, segue-se que $C(z_n) = \bar{z}_{l-m} = \alpha^{(n-m)} - i\beta^{(n-m)}$.

Desse modo, uma vez determinado os pares antes-depois de uma colisão p-p, temos $2n$ estados ao todo. Os demais estados restantes são obtidos considerando os seus negativos.

Em suma, temos:

1) m estados:

$$C(z_l) = -\bar{z}_{n-m+l} \iff C[(\alpha^{(l)}, \beta^{(l)})] = (-\alpha^{(n-m+l)}, \beta^{(n-m+l)}), \quad l \leq m.$$

2) $n-m$ estados:

$$C(z_l) = \bar{z}_{l-m} \iff C[(\alpha^{(l)}, \beta^{(l)})] = (\alpha^{(l-m)}, -\beta^{(l-m)}), \quad m < l \leq n-1,$$

e

$$C(z_n) = \bar{z}_{n-m} \iff C[(-\alpha^{(n)}, \beta^{(n)})] = (\alpha^{(n-m)}, -\beta^{(n-m)}), \quad l = n.$$

Assim, o inteiro m pode ser interpretado como sendo o número a ser acrescentado ao índice dos estados na lista, a fim de se obter o seu complexo conjugado: seja $C(z_l) = -\bar{z}_{n-m+l}$ e $C(z_l) = \bar{z}_{l-m}$; trocando l por $l+m$, obtemos $C(z_{l+m}) = -\bar{z}_{n+l} = \bar{z}_l$ e $C(z_{l+m}) = \bar{z}_l$, pois $n+l > n$. Ainda, se $l+m = n$, temos $C(z_n) = \bar{z}_{n-m}$.

Os $4n$ estados também podem ser obtidos pela seguinte função

$$C(z_l) = \begin{cases} -\bar{z}_{n-m+l} = -\alpha^{(n-m+l)} + i\beta^{(n-m+l)} & l < m \\ \bar{z}_{l-m} = \alpha^{(l-m)} - i\beta^{(l-m)} & l > m \\ -\bar{z}_{n-m+l} = \alpha^{(n)} + i\beta^{(n)} & l = m \\ \bar{z}_{l-m} = \alpha^{(l-m)} - i\beta^{(l-m)} & l = n \end{cases}, \quad (3.25)$$

em que $z_n = -\alpha^{(n)} + i\beta^{(n)}$, $z_0 = \alpha^{(n)} + i\beta^{(n)}$, $z_n = -\bar{z}_0$. Isto nos permite definir uma função para os índices dos estados, $\sigma = f_2(l)$, dada por

$$\sigma = \begin{cases} n - m + l, & l < m \\ l - m, & l > m \\ n, & l = m \\ n - m, & l = n \end{cases}. \quad (3.26)$$

Para a análise do caso quântico no capítulo seguinte, a função de onda será construída associando-se cada par de estados antes-depois de uma colisão p-p a um par de ondas planas,

$$(\alpha^{(l)}, \beta^{(l)}) \mapsto e^{i(\alpha^{(l)}x_1 + \beta^{(l)}x_2)}, \quad (3.27a)$$

$$(\alpha^{(\sigma)}, \beta^{(\sigma)}) \mapsto e^{i(\alpha^{(\sigma)}x_1 + \beta^{(\sigma)}x_2)}, \quad (3.27b)$$

em uma solução básica (solução base), com a qual obteremos uma função de onda estendida para qualquer triângulo retângulo racional em função do índice l no intervalo $[1, n]$. Como os estados são gerados por colisões clássicas e as ondas planas correspondentes são no âmbito quântico, as Eqs. (3.27) são a essência da nossa análise semiclássica aplicada no Capítulo 4. Dessa forma, podemos analisar alguns casos particulares de interesse.

O Sistema Quântico e um *Ansatz* de Bethe Estendido

Sistemas clássicos integráveis são sistemas físicos que possuem solução analítica exata das equações de movimento ou, pelo menos, podem ser representadas por meio de simples quadraturas [176] (apesar desta possibilidade não ser tratada no presente trabalho) graças ao fato de possuírem todas as integrais de movimento determinadas. Por outro lado, sistemas quânticos integráveis, conforme a definição de B. Sutherland apresentada no Capítulo 2, são sistemas físicos que não exibem espalhamento difrativo; nesse caso, a função de onda pode ser determinada de forma exata pela suposição, ou *Ansatz*, de ela ser uma superposição finita de ondas planas. Esta suposição é denominada de *Ansatz* de Bethe.

O *Ansatz* de Bethe é aplicável a sistemas de partículas idênticas, como um gás de bósons ou férmions em uma região 1D, sistemas de *spin* 1D, etc. M. Gaudin [33], por exemplo, obteve a função de onda exata para um sistema de N bósons idênticos confinados em uma caixa 1D, ou seja, o sistema é quanticamente integrável e, claramente, também o caso $N = 2$. Como as partículas podem tunelar, esse caso particular equivale ao confinamento de uma partícula em um bilhar quadrado com uma parede permeável em sua diagonal, por causa do potencial de interação das partículas ser um delta de Dirac no modelo 1D. Quando as duas partículas são impenetráveis, o bilhar torna-se um triângulo retângulo isósceles, que também é quanticamente integrável [134].

Vimos no Capítulo 2 que, do ponto de vista da teoria de grupos, alguns sistemas de partículas de massas diferentes admitem funções de onda do tipo *Ansatz* de Bethe apenas para partículas impenetráveis com valores de massas específicos, ou seja, são quanticamente integráveis. No entanto, propomos uma abordagem diferente para entender esse

problema, usando resultados clássicos do Capítulo 3 no problema quântico, que denominamos de análise semiclássica. Em particular, o sistema de interesse imediato é aquele formado por duas partículas de razão de massas $\gamma = 3$ em uma caixa 1D, pois é classicamente integrável, mas é desconhecida pela literatura se a sua versão quântica, com tunelamento entre as duas partículas, é integrável. O bilhar correspondente a esse caso é um retângulo, com uma parede permeável em sua diagonal, formado por dois triângulos hemiequiláteros. Quando as partículas quânticas são impenetráveis, o bilhar correspondente é o triângulo hemiequilátero, que também é quanticamente integrável [134].

Para analisar esse sistema físico, iremos discutir inicialmente a equação de Schrödinger para duas partículas de massas quaisquer em uma dimensão. No caso confinado, proporemos formas específicas para a função de onda, baseadas no *Ansatz* de Bethe e em considerações semiclássicas. As soluções puramente de espalhamento, ou seja, no caso onde não há confinamento espacial, serão os componentes básicos para compor a função de onda estendida. É importante notar que tais componentes dependem de um dos ângulos internos do bilhar triangular. Impondo as condições de contorno de anulamento da função de onda em $x_1 = 0$ e em $x_2 = 0$ (veja a subseção 4.2.1), obteremos a relação entre as amplitudes das ondas planas dessa expansão. Aplicamos, então, esse resultado geral para os casos classicamente integráveis $\gamma = 1$ e $\gamma = 3$, e o pseudointegrável $\gamma = \frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}-1}$ no fim da subseção 4.2.6.

4.1 Equação de Schrödinger para Duas Partículas em Coordenadas e Números de Onda Normalizados

Inicialmente, resolvemos a Equação de Schrödinger para duas partículas movendo-se sobre uma reta e interagindo por um potencial de curto alcance. Quando elas se encontram, poderá ocorrer colisão ou transmissão dessas partículas. Em qualquer caso, a solução obtida será a base para a construção da solução para partículas confinadas, pois, por ser de curto alcance, a interação das partículas independe da presença das bordas do potencial confinante da caixa 1D. Em seguida, na subseção seguinte, analisaremos o caso das partículas confinadas. Para se construir a solução quântica exata, partiremos do resultado clássico conhecido, que é a indução de um número finito de velocidades pelo sistema físico para determinadas razões de massas quando se inclui as bordas da caixa 1D.

4.1.1 Análise da Solução para o Caso de Duas Partículas não Confinadas

Considere duas partículas de massas m_1 e m_2 quaisquer. Elas interagem por um potencial de curto alcance $V(q_1, q_2) = \lambda \delta(q_1 - q_2)$ na reta, em que λ é a intensidade do potencial e $\delta(q_1 - q_2)$ é o delta de Dirac. A equação de Schrödinger correspondente é

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2 \Psi(q_1, q_2)}{\partial q_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2 \Psi(q_1, q_2)}{\partial q_2^2} + \lambda \delta(q_1 - q_2) \Psi(q_1, q_2) = E \Psi(q_1, q_2). \quad (4.1)$$

Como posteriormente as partículas serão confinadas em uma caixa 1D, elas interagirão repetidamente entre si, gerando um conjunto de pares de velocidades, que denominamos de estados.

Da análise clássica do Capítulo 3, sabemos que cada interação corresponde a uma reflexão por um ângulo θ dado por $\theta = 2 \arctg \sqrt{\gamma}$ no espaço de estados, o qual é uma circunferência de raio \sqrt{E} . Quando $\frac{\theta}{\pi}$ for racional, o número de estados é finito. Então, temos uma maneira direta para determinar a função de onda em cada interação entre as partículas de forma recursiva, associando cada estado normalizado a uma onda plana, conforme as Eqs. (3.27). Em vista disso, devemos aplicar a mudança de coordenadas de posição $x_i = \sqrt{m_i} q_i$ das partículas,

$$-\frac{\partial^2 \Psi(x_1, x_2)}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2 \Psi(x_1, x_2)}{\partial x_2^2} + 2\tilde{\lambda} \delta(x) \Psi(x_1, x_2) = \mathcal{E} \Psi(x_1, x_2), \quad (4.2)$$

em que

$$x = x_1 \sin \frac{\theta}{2} - x_2 \cos \frac{\theta}{2} \quad (4.3)$$

é a coordenada relativa decorrente de $q = q_1 - q_2$, $M = m_1 + m_2$, $\cos \frac{\theta}{2} = \sqrt{\frac{m_1}{M}}$, $\sin \frac{\theta}{2} = \sqrt{\frac{m_2}{M}}$, $\mu = \frac{m_1 m_2}{M}$, $\tilde{\lambda} = \frac{\lambda \sqrt{\mu}}{\hbar^2}$ e $\mathcal{E} = \frac{2E}{\hbar^2}$.

Da definição de coordenada do centro de massa, $Q = \frac{m_1 q_1 + m_2 q_2}{M}$, também obtemos o centro de massa em termos de x_i ,

$$X = x_1 \cos \frac{\theta}{2} + x_2 \sin \frac{\theta}{2}. \quad (4.4)$$

Perceba que as Eqs. (4.3) e (4.4) constituem uma rotação anti-horária de $\frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}$, ou seja, o espaço de configuração x - X é o espaço de configuração $\hat{\mathbf{C}}^2$ rotacionado (veja o **Apêndice F**).

Admitindo-se que $\Psi(x_1, x_2) = \phi(X) \varphi(x)$, obtemos duas equações diferenciais ordiná-

rias,

$$D_x^2 \varphi(x) - 2\tilde{\lambda} \delta(x) \varphi(x) + \kappa^2 \varphi(x) = 0, \quad (4.5)$$

$$D_X^2 \phi(X) + \mathcal{K}^2 \phi(X) = 0, \quad (4.6)$$

em que $\kappa^2 = \mathcal{E} - \mathcal{K}^2$, $\kappa = \frac{k_r}{\sqrt{\mu}}$, $\mathcal{K} = \frac{K_{cm}}{\sqrt{M}}$, k_r é o número de onda relativo e K_{cm} é o número de onda do centro de massa.

A solução de cada uma dessas equações diferenciais são analisadas a seguir.

Solução da Eq. (4.5):

Por ser um potencial delta de Dirac, a função $\varphi(x)$ é contínua em $x = 0$ ($\varphi(0+) = \varphi(0-) = \varphi(0)$), mas a sua derivada não o é: integrando a Eq. (4.5) entre $-\epsilon$ e ϵ e fazendo o limite $\epsilon \rightarrow 0$, a descontinuidade da derivada de $\varphi(x)$ em $x = 0$ é

$$D_x \varphi(0+) - D_x \varphi(0-) = 2\tilde{\lambda} \varphi(0). \quad (4.7)$$

O potencial delta de Dirac divide a reta em duas regiões:

Região de incidência de $x < 0$ para $x > 0$:

$$\varphi_1(x) = \begin{cases} \mathfrak{A} e^{i\kappa x} + \mathfrak{B} e^{-i\kappa x}, & x \leq 0 \\ \mathfrak{C} e^{i\kappa x}, & x \geq 0 \end{cases}. \quad (4.8)$$

Escrevemos $x \leq 0$ ($x \geq 0$) em vez de $x < 0$ ($x > 0$) porque já estabelecemos a continuidade da função de onda. Substituindo a Eq. (4.8) em (4.7) e sendo $\mathfrak{C} = \mathfrak{A} + \mathfrak{B}$ (decorrente da continuidade de $\varphi(x)$ em $x = 0$), temos

$$\mathfrak{B} = R\mathfrak{A}, \quad R = -\frac{i\tilde{\lambda}}{\kappa + i\tilde{\lambda}}, \quad \text{e} \quad \mathfrak{C} = T\mathfrak{A}, \quad T = \frac{\kappa}{\kappa + i\tilde{\lambda}},$$

em que R e T são os coeficientes de reflexão e transmissão tais que $1 + R = T$.

Região de incidência de $x > 0$ para $x < 0$:

$$\varphi_2(x) = \begin{cases} \mathfrak{C}' e^{-i\kappa x}, & x \leq 0 \\ \mathfrak{A}' e^{-i\kappa x} + \mathfrak{B}' e^{i\kappa x}, & x \geq 0 \end{cases}. \quad (4.9)$$

Procedendo-se de maneira análoga ao caso $\varphi_1(x)$, obtemos de $\varphi_2(x)$,

$$\mathfrak{B}' = R\mathfrak{A}', \quad R = -\frac{i\tilde{\lambda}}{\kappa + i\tilde{\lambda}}, \quad \text{e} \quad \mathfrak{C}' = T\mathfrak{A}', \quad T = \frac{\kappa}{\kappa + i\tilde{\lambda}}.$$

Como as partículas serão confinadas em uma caixa 1D, precisaremos das duas soluções $\varphi_1(x)$ e $\varphi_2(x)$. Pelo princípio da superposição, $\varphi(x) = \varphi_1(x) + \varphi_2(x)$ também é uma solução. Em princípio, deveríamos ter escrito $\varphi(x) = c_1\varphi_1(x) + c_2\varphi_2(x)$, com c_i sendo coeficientes complexos quaisquer, por parecer mais geral que uma simples soma de $\varphi_1(x)$ e $\varphi_2(x)$. Este não é o caso, pois a arbitrariedade requerida para $\varphi(x)$ já está implícita nos coeficientes \mathfrak{A} e \mathfrak{A}' ,

$$\varphi(x) = \begin{cases} (e^{i\kappa x} + Re^{-i\kappa x})\mathfrak{A} + (Te^{-i\kappa x})\mathfrak{A}', & x \leq 0 \\ (Te^{i\kappa x})\mathfrak{A} + (e^{-i\kappa x} + Re^{i\kappa x})\mathfrak{A}', & x \geq 0 \end{cases}. \quad (4.10)$$

Podemos reexpressar a Eq. (4.10), a fim de evidenciar as ondas planas conforme o movimento seja no sentido positivo (para a direita) ou negativo (para a esquerda),

$$\varphi(x) = \begin{cases} \mathfrak{A}e^{i\kappa x} + (R\mathfrak{A} + T\mathfrak{A}')e^{-i\kappa x}, & x \leq 0 \\ \mathfrak{A}'e^{-i\kappa x} + (R\mathfrak{A}' + T\mathfrak{A})e^{i\kappa x}, & x \geq 0 \end{cases}. \quad (4.11)$$

Como $1 + R = T$, as segundas parcelas da Eq. (4.11) podem ser escritas como

$$R\mathfrak{A} + T\mathfrak{A}' = \mathfrak{A} \frac{\frac{R}{T} + \frac{\mathfrak{A}'}{\mathfrak{A}}}{1 - \frac{R}{T}}, \quad R\mathfrak{A}' + T\mathfrak{A} = \frac{\frac{R}{T}\mathfrak{A}' + \mathfrak{A}}{1 - \frac{R}{T}}.$$

O coeficiente \mathfrak{A} é arbitrário, então podemos escolher, por conveniência, $\mathfrak{A} = 1 - \frac{R}{T} = 1 + \frac{i\tilde{\lambda}}{\kappa}$, e usando $-\frac{i\tilde{\lambda}}{\kappa} = \overline{\mathfrak{A}} - 1$, obtemos

$$\varphi(x) = \begin{cases} \mathfrak{A}e^{i\kappa x} + (\overline{\mathfrak{A}} - 1 + \frac{\mathfrak{A}'}{\mathfrak{A}})e^{-i\kappa x}, & x \leq 0 \\ \mathfrak{A}'e^{-i\kappa x} + [\frac{\mathfrak{A}'}{\mathfrak{A}}(\overline{\mathfrak{A}} - 1) + 1]e^{i\kappa x}, & x \geq 0 \end{cases}, \quad (4.12)$$

a qual permanece contínua e com a sua derivada primeira descontínua em $x = 0$, pois é a soma de duas outras funções com essas propriedades no mesmo ponto. Por isso, manteve-se $x \leq 0$ e $x \geq 0$ na Eq. (4.12), como está demonstrado abaixo:

Continuidade: $\varphi^-(0) = \varphi^+(0)$.

Como $\overline{\mathfrak{A}} + \mathfrak{A} = 2$, segue-se que

$$\varphi^-(0) = 1 + \frac{\mathfrak{A}'}{\mathfrak{A}},$$

$$\varphi^+(0) = 1 + \frac{\mathfrak{A}'}{\mathfrak{A}},$$

ou seja, a função $\varphi(x)$ é contínua em $x = 0$.

Descontinuidade: Determinando a derivada primeira da Eq. (4.12), obtemos

$$D_x\varphi(0+) - D_x\varphi(0-) = \imath\kappa(-\mathfrak{A} + \overline{\mathfrak{A}}) \left(1 + \frac{\mathfrak{A}'}{\mathfrak{A}}\right), \quad (4.13)$$

e da continuidade de $\varphi(x)$ em $x = 0$, obtemos

$$D_x\varphi(0+) - D_x\varphi(0-) = 2\tilde{\lambda}\varphi(0), \quad (4.14)$$

que é a condição de contorno representando a interação delta de Dirac.

A função de onda da Eq. (4.12) não apresenta simetria para $\frac{\mathfrak{A}'}{\mathfrak{A}}$ arbitrária. No entanto, quando $\frac{\mathfrak{A}'}{\mathfrak{A}} = 1$, $\varphi(x)$ é simétrica,

$$\varphi_s(x) = \begin{cases} \mathfrak{A}e^{\imath\kappa x} + \overline{\mathfrak{A}}e^{-\imath\kappa x}, & x \leq 0 \\ \mathfrak{A}e^{-\imath\kappa x} + \overline{\mathfrak{A}}e^{\imath\kappa x}, & x \geq 0 \end{cases}, \quad (4.15)$$

e quando $\frac{\mathfrak{A}'}{\mathfrak{A}} = -1$, $\varphi(x)$ é antissimétrica,

$$\varphi_a(x) = \begin{cases} \mathfrak{A}(e^{\imath\kappa x} - e^{-\imath\kappa x}), & x \leq 0 \\ \mathfrak{A}(-e^{-\imath\kappa x} + e^{\imath\kappa x}), & x \geq 0 \end{cases}. \quad (4.16)$$

Para a função de onda simétrica, a Eq. (4.13) é não nula; consequentemente, usando as Eqs. (4.14) e (4.15), conclui-se que o coeficiente \mathfrak{A} depende da intensidade $\tilde{\lambda}$ do potencial; logo a função de onda $\varphi(x) = \varphi_s(x)$ é

$$\varphi(x) = \begin{cases} a^-(\kappa)e^{\imath\kappa x} + a^-(-\kappa)e^{-\imath\kappa x}, & x \leq 0 \\ a^+(-\kappa)e^{-\imath\kappa x} + a^+(\kappa)e^{\imath\kappa x}, & x \geq 0 \end{cases}, \quad (4.17)$$

em que

$$a^-(\kappa) = 1 + \frac{\imath\tilde{\lambda}}{\kappa} = a^+(-\kappa), \quad a^-(-\kappa) = 1 + \frac{\imath\tilde{\lambda}}{-\kappa} = a^+(\kappa),$$

ou seja, a função de onda tem um valor não nulo em $x = 0$.

Para a função de onda antissimétrica, a Eq. (4.13) é nula; consequentemente, o coeficiente \mathfrak{A} não depende de $\tilde{\lambda}$ e a função de onda é nula em $x = 0$.

Assim, como o interesse aqui é a investigação do caso em que o perfil da função de onda dependa da intensidade de interação do potencial, não usaremos a solução antissimétrica. A solução antissimétrica será importante apenas para se obter a solução conhecida do bilhar quadrado, conforme a discussão na subseção 4.2.2.

Solução da Eq. (4.6):

O movimento do centro de massa dada pela Eq. (4.6) equivale ao movimento livre de uma partícula no intervalo $(-\infty, \infty)$ ou, com as condições de contorno apropriadas, de uma partícula confinada em um poço de potencial infinito de extensão $X \in [0, \sqrt{M}L]$, com números de onda \mathcal{K} e $-\mathcal{K}$,

$$\phi(X) = Ae^{i\mathcal{K}X} + Be^{-i\mathcal{K}X}. \quad (4.18)$$

Solução Base para o Caso com $\varphi(x)$ Simétrica

O produto das funções dada pelas Eqs. (4.17) e (4.18), juntamente com a imposição das condições de contorno (continuidade, descontinuidade da derivada primeira e anulação da função de onda nas extremidades de $[\sqrt{m_1}L, \sqrt{m_2}L]$), consistirá na solução do nosso problema. Assim, de $\Psi(x_1, x_2) = \phi(X)\varphi(x)$, temos

$$\Psi(x_1, x_2) = \begin{cases} Aa^-(\kappa)e^{i(\mathcal{K}X+\kappa x)} + Aa^-(-\kappa)e^{i(\mathcal{K}X-\kappa x)} + \\ + Ba^-(\kappa)e^{i(-\mathcal{K}X+\kappa x)} + Ba^-(-\kappa)e^{i(-\mathcal{K}X-\kappa x)}, & x \leq 0 \\ Aa^+(-\kappa)e^{i(\mathcal{K}X-\kappa x)} + Aa^+(\kappa)e^{i(\mathcal{K}X+\kappa x)} + \\ + Ba^+(-\kappa)e^{i(-\mathcal{K}X-\kappa x)} + Ba^+(\kappa)e^{i(-\mathcal{K}X+\kappa x)}, & x \geq 0 \end{cases}. \quad (4.19)$$

Para expressar a função de onda $\Psi(x_1, x_2)$ em termos dos números de onda das partículas imediatamente antes e depois da interação, determinamos antes \mathcal{K} and κ . Da conservação da energia, $\mathcal{E} = \frac{K_{\text{cm}}^2}{M} + \frac{k_r^2}{\mu} = \frac{k_1^2}{m_1} + \frac{k_2^2}{m_2}$, em que $K_{\text{cm}} = k_1 + k_2$ e $k_r = \frac{m_2 k_1 - m_1 k_2}{M}$. Além disso, como $\mathcal{E} = \mathcal{K}^2 + \kappa^2 = \kappa_1^2 + \kappa_2^2$, temos

$$\begin{aligned} \mathcal{K} &= \kappa_1 \cos \frac{\theta}{2} + \kappa_2 \sin \frac{\theta}{2}, \\ \kappa &= \kappa_1 \sin \frac{\theta}{2} - \kappa_2 \cos \frac{\theta}{2}, \end{aligned} \quad (4.20)$$

ou seja, os números de onda de centro de massa e relativo normalizados correspondem a uma reflexão por um ângulo $\frac{\theta}{2}$, a mesma regra de troca de momentos em colisões p-p. Logo, juntamente com as Eqs. (4.3) e (4.4), obtemos

$$\begin{aligned} \mathcal{K}X + \kappa x &= \kappa_1 x_1 + \kappa_2 x_2, \\ \mathcal{K}X - \kappa x &= (\kappa_1 \cos \theta + \kappa_2 \sin \theta)x_1 + (\kappa_1 \sin \theta - \kappa_2 \cos \theta)x_2 = \kappa'_1 x_1 + \kappa'_2 x_2, \end{aligned} \quad (4.21)$$

de modo que a função de onda fica

$$\Psi(x_1, x_2) = \begin{cases} Aa^-(\kappa_1, \kappa_2)e^{i(\kappa_1 x_1 + \kappa_2 x_2)} + Aa^-(\kappa'_1, \kappa'_2)e^{i(\kappa'_1 x_1 + \kappa'_2 x_2)} + \\ + Ba^-(\kappa'_1, -\kappa'_2)e^{-i(\kappa'_1 x_1 + \kappa'_2 x_2)} + Ba^-(\kappa_1, -\kappa_2)e^{-i(\kappa_1 x_1 + \kappa_2 x_2)}, & x_1 \leq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}} \\ Aa^+(\kappa'_2, \kappa'_1)e^{i(\kappa'_2 x_2 + \kappa'_1 x_1)} + Aa^+(\kappa_2, \kappa_1)e^{i(\kappa_2 x_2 + \kappa_1 x_1)} + \\ + Ba^+(\kappa_2, -\kappa_1)e^{-i(\kappa_2 x_2 + \kappa_1 x_1)} + Ba^+(\kappa'_2, -\kappa'_1)e^{-i(\kappa'_2 x_2 + \kappa'_1 x_1)}, & x_1 \geq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}} \end{cases} \quad (4.22)$$

A Eq. (4.22) fornece a função de onda tanto para o movimento do centro de massa associado ao número de onda \mathcal{K} (ondas planas com coeficiente A), quanto para o movimento do centro de massa associado ao número de onda $-\mathcal{K}$ (ondas planas com coeficiente B). Note também que cada onda plana está acompanhada por um coeficiente que depende do número de onda relativo e da intensidade do potencial. No entanto, podemos expressar esses coeficientes em função de apenas um deles. Considere a função de onda para $x_1 \leq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}}$ e

$$a^-(\kappa_1, \kappa_2) = 1 + \frac{i\tilde{\lambda}}{\kappa_1 \sin \frac{\theta}{2} - \kappa_2 \cos \frac{\theta}{2}} := \mathbf{a}, \quad (4.23)$$

o coeficiente da onda plana $e^{i(\kappa_1 x_1 + \kappa_2 x_2)}$; se ela for a onda plana incidente, o número de onda relativo $\kappa = f_3(\kappa_1, \kappa_2)$, dado pela Eq. (4.20), é positiva; logo, sendo $e^{i(\kappa'_1 x_1 + \kappa'_2 x_2)}$ a onda plana espalhada, o número de onda $\kappa' = f_3(\kappa'_1, \kappa'_2)$ é tal que $\kappa' = -\kappa$, pois as partículas se afastam entre si. Então, isso significa que $f_3(-\kappa'_1, -\kappa'_2) = -\kappa'$, ou seja, $f_3(-\kappa'_1, -\kappa'_2) = \kappa$; analogamente, temos $f_3(-\kappa_1, -\kappa_2) = \kappa'$. Portanto, os coeficientes das ondas planas correspondentes são

$$a^-(\kappa'_1, -\kappa'_2) = a^-(\kappa_1, \kappa_2) = \mathbf{a}, \quad (4.24)$$

$$a^-(\kappa'_1, \kappa'_2) = a^-(\kappa_1, -\kappa_2) = \overline{a^-(\kappa_1, \kappa_2)} = \bar{\mathbf{a}}. \quad (4.25)$$

Para a função de onda em $x_1 \geq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}}$, as partículas estão em posições trocadas, de maneira que a razão de massas, entendida como a razão da massa da partícula da esquerda em relação a da direita, também está trocada, ou seja, $\gamma' = \gamma^{-1}$. Consequentemente, pela Eq. (3.8), o parâmetro $\theta' = \pi - \theta$ e o coeficiente $a^+(\kappa'_2, \kappa'_1)$ é

$$a^+(\kappa'_2, \kappa'_1) = 1 + \frac{i\tilde{\lambda}}{\kappa'_2 \sin \frac{\theta'}{2} - \kappa'_1 \cos \frac{\theta'}{2}}.$$

Usando as definições de κ'_1 e κ'_2 em termos de κ_1 , κ_2 e θ , mostra-se que $a^+(\kappa'_2, \kappa'_1) =$

$a^-(\kappa_1, \kappa_2)$. Consequentemente,

$$a^+(\kappa'_2, \kappa'_1) = a^+(-\kappa_2, -\kappa_1) = \mathbf{a}, \quad a^+(\kappa_2, \kappa_1) = a^+(-\kappa'_2, -\kappa'_1) = \bar{\mathbf{a}},$$

e a Eq. (4.22) fica

$$\Psi(x_1, x_2) = \begin{cases} A\mathbf{a}e^{i(\kappa_1 x_1 + \kappa_2 x_2)} + A\bar{\mathbf{a}}e^{i(\kappa'_1 x_1 + \kappa'_2 x_2)} + B\mathbf{a}e^{-i(\kappa'_1 x_1 + \kappa'_2 x_2)} + B\bar{\mathbf{a}}e^{-i(\kappa_1 x_1 + \kappa_2 x_2)}, & x_1 \leq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}} \\ A\mathbf{a}e^{i(\kappa'_2 x_2 + \kappa'_1 x_1)} + A\bar{\mathbf{a}}e^{i(\kappa_2 x_2 + \kappa_1 x_1)} + B\mathbf{a}e^{-i(\kappa_2 x_2 + \kappa_1 x_1)} + B\bar{\mathbf{a}}e^{-i(\kappa'_2 x_2 + \kappa'_1 x_1)}, & x_1 \geq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}} \end{cases}. \quad (4.26)$$

A Eq. (4.26) mostra que as ondas planas com coeficiente B ,

$$\mathbf{a}e^{-i(\kappa'_1 x_1 + \kappa'_2 x_2)} + \bar{\mathbf{a}}e^{-i(\kappa_1 x_1 + \kappa_2 x_2)} \quad \text{e} \quad \mathbf{a}e^{-i(\kappa_2 x_2 + \kappa_1 x_1)} + \bar{\mathbf{a}}e^{-i(\kappa'_2 x_2 + \kappa'_1 x_1)},$$

são obtidas das ondas planas com coeficiente A ,

$$\mathbf{a}e^{i(\kappa_1 x_1 + \kappa_2 x_2)} + \bar{\mathbf{a}}e^{i(\kappa'_1 x_1 + \kappa'_2 x_2)} \quad \text{e} \quad \mathbf{a}e^{i(\kappa'_2 x_2 + \kappa'_1 x_1)} + \bar{\mathbf{a}}e^{i(\kappa_2 x_2 + \kappa_1 x_1)},$$

por conjugação complexa. Dessa forma, a parte da função de onda associada a cada um desses movimentos do centro de massa são semelhantes, podendo ser usada para evitar a repetição dos cálculos para os dois movimentos do centro de massa contidos na Eq. (4.22). Por isso, basta escolhermos uma delas para a definição de solução base. Escolhemos aquela com coeficiente A ,

$$\Psi(x_1, x_2) = \begin{cases} A\mathbf{a}e^{i(\kappa_1 x_1 + \kappa_2 x_2)} + A\bar{\mathbf{a}}e^{i(\kappa'_1 x_1 + \kappa'_2 x_2)}, & x_1 \leq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}} \\ A\mathbf{a}e^{i(\kappa'_2 x_2 + \kappa'_1 x_1)} + A\bar{\mathbf{a}}e^{i(\kappa_2 x_2 + \kappa_1 x_1)}, & x_1 \geq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}} \end{cases}. \quad (4.27)$$

Como as funções de onda $\phi(X)$ e $\varphi(x)$ são contínuas, satisfazem a Equação de Schrödinger e a derivada primeira de $\varphi(x)$ tem a descontinuidade do delta de Dirac, então o mesmo vale para $\Psi(x_1, x_2) = \phi(X)\varphi(x)$, como está demonstrado no **Apêndice G**.

A função de onda da Eq. (4.27) fornece a solução básica do problema, pois ela exauri todos os resultados possíveis no encontro das partículas em $x_1 = \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}}$: estando as partículas na região $x_1 < \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}}$, com números de onda κ_1 e κ_2 , o centro de massa move-se em um determinado sentido; após o encontro em $x_1 = \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}}$, duas coisas podem acontecer: colisão das partículas, resultando em números de onda κ'_1 e κ'_2 , com a permanência delas na região $x_1 < \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}}$; ou transmissão das partículas para a região $x_1 > \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}}$, mantendo os números de onda κ_1 e κ_2 . Situação semelhante a essa também ocorre se as partículas estivessem inicialmente na região $x_1 > \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}}$.

4.1.2 A Simetria de Reflexão Espacial Contida na Solução Base da Função de Onda

No caso clássico, vimos que a troca de momentos nas colisões entre as partículas é uma reflexão por um ângulo θ no espaço de configuração normalizado. Essa propriedade está presente na solução base, Eq. (4.27). Primeiramente, reescrevemos essa equação,

$$\begin{cases} \Psi^-(x_1, x_2) = A (\mathfrak{a}e^{i(\kappa_1 x_1 + \kappa_2 x_2)} + \bar{\mathfrak{a}}e^{i(\kappa'_1 x_1 + \kappa'_2 x_2)}) , & x_1 \leq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}} \\ \Psi^+(x_1, x_2) = A (\mathfrak{a}e^{i(\kappa'_2 x_2 + \kappa'_1 x_1)} + \bar{\mathfrak{a}}e^{i(\kappa_2 x_2 + \kappa_1 x_1)}) , & x_1 \geq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}} \end{cases} . \quad (4.28)$$

Considerando a função de onda $\Psi^-(x_1, x_2)$, observa-se que uma mudança da onda plana $e^{i(\kappa_1 x_1 + \kappa_2 x_2)}$ para a onda plana $e^{i(\kappa'_1 x_1 + \kappa'_2 x_2)}$ se deve à troca dos momentos em (κ_1, κ_2) para os momentos em (κ'_1, κ'_2) via reflexão por um ângulo θ , mantendo o mesmo domínio espacial $x_1 \leq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}}$. Interpretação semelhante se aplica à função de onda $\Psi^+(x_1, x_2)$.

A função de onda $\Psi^+(x_1, x_2)$ pode ser também obtida refletindo o domínio espacial de $\Psi^-(x_1, x_2)$ em relação a $x_1 = \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}}$ a partir da reflexão dos momentos das partículas: considere o argumento da onda plana $e^{i(\kappa_1 x_1 + \kappa_2 x_2)}$ da função de onda $\Psi^-(x_1, x_2)$,

$$\kappa_1 x_1 + \kappa_2 x_2. \quad (4.29)$$

Lembremos que uma transformação de reflexão, em notação complexa, é

$$R = e^{i\theta} \bar{R}_0 \Leftrightarrow R_0 = e^{i\theta} \bar{R},$$

de maneira que

$$\begin{aligned} (\kappa'_1, \kappa'_2) &= (\kappa_1 \cos \theta + \kappa_2 \sin \theta, \kappa_1 \sin \theta - \kappa_2 \cos \theta) \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow (\kappa_1, \kappa_2) = (\kappa'_1 \cos \theta + \kappa'_2 \sin \theta, \kappa'_1 \sin \theta - \kappa'_2 \cos \theta). \end{aligned}$$

Assim,

$$\kappa_1 x_1 + \kappa_2 x_2 = (\kappa'_1 \cos \theta + \kappa'_2 \sin \theta) x_1 + (\kappa'_1 \sin \theta - \kappa'_2 \cos \theta) x_2,$$

e reunindo os termos em um mesmo κ'_1 e κ'_2 ,

$$\kappa_1 x_1 + \kappa_2 x_2 = \kappa'_1 x'_1 + \kappa'_2 x'_2, \quad (4.30)$$

em que x'_1 e x'_2 são as coordenadas refletidas por um ângulo θ ,

$$(x'_1, x'_2) = (x_1 \cos \theta + x_2 \sin \theta, x_1 \sin \theta - x_2 \cos \theta),$$

em que $x'_1 \geq \frac{x'_2}{\sqrt{\gamma}}$, ou seja, a reflexão dos momentos implica em reflexão espacial.

Com o mesmo procedimento aplicado ao argumento da onda plana $e^{i(\kappa'_1 x_1 + \kappa'_2 x_2)}$ de $\Psi^-(x_1, x_2)$, obtemos

$$\kappa'_1 x_1 + \kappa'_2 x_2 = \kappa_1 x'_1 + \kappa_2 x'_2. \quad (4.31)$$

Então, a função de onda $\Phi^+(x'_1, x'_2)$ devido à reflexão espacial é

$$\Phi^+(x'_1, x'_2) = A \left(\mathbf{a} e^{i(\kappa'_2 x'_2 + \kappa'_1 x'_1)} + \bar{\mathbf{a}} e^{i(\kappa_2 x'_2 + \kappa_1 x'_1)} \right),$$

que é justamente a função de onda $\Psi^+(x_1, x_2)$, contanto que $x'_i = x_i$.

4.2 Proposta de Função de Onda: *Ansatz* de Bethe Estendido

Propomos aqui uma função de onda do tipo *Ansatz* de Bethe estendido para descrever o sistema de duas partículas de massas quaisquer e que interagem por um potencial delta de Dirac em uma caixa 1D (veja a Fig. 4.1(a)). Se γ for tal que $\frac{\theta}{\pi}$ é racional, esse sistema equivale a um bilhar retangular, contendo uma parede permeável em sua diagonal, formado por dois triângulos retângulos racionais (veja a Fig. 4.1(b)). Essa versão estendida é construída superpondo soluções base conforme o número de estados clássicos de pares de estados antes-depois de uma colisão p-p. Por meio das condições de contorno, investigamos as restrições que impedem uma solução por *Ansatz* de Bethe quando os triângulos retângulos são classicamente integráveis ($\gamma = 3$). Analisamos também o caso mais simples envolvendo bilhares triângulo retângulo pseudointegráveis ($\gamma = \frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}-1}$).

Considere a solução base, Eq. (4.27), para um par de estados clássicos antes-depois de uma colisão p-p, de acordo com as Eqs. (3.26) e (3.27),

$$\Psi_l(x_1, x_2) = \begin{cases} A_l a_l e^{i(\alpha^{(l)} x_1 + \beta^{(l)} x_2)} + A_l \bar{a}_l e^{i(\alpha^{(\sigma)} x_1 + \beta^{(\sigma)} x_2)}, & x_1 \leq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}} \\ A_l a_l e^{i(\alpha^{(\sigma)} x_1 + \beta^{(\sigma)} x_2)} + A_l \bar{a}_l e^{i(\alpha^{(l)} x_1 + \beta^{(l)} x_2)}, & x_1 \geq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}} \end{cases}, \quad (4.32)$$

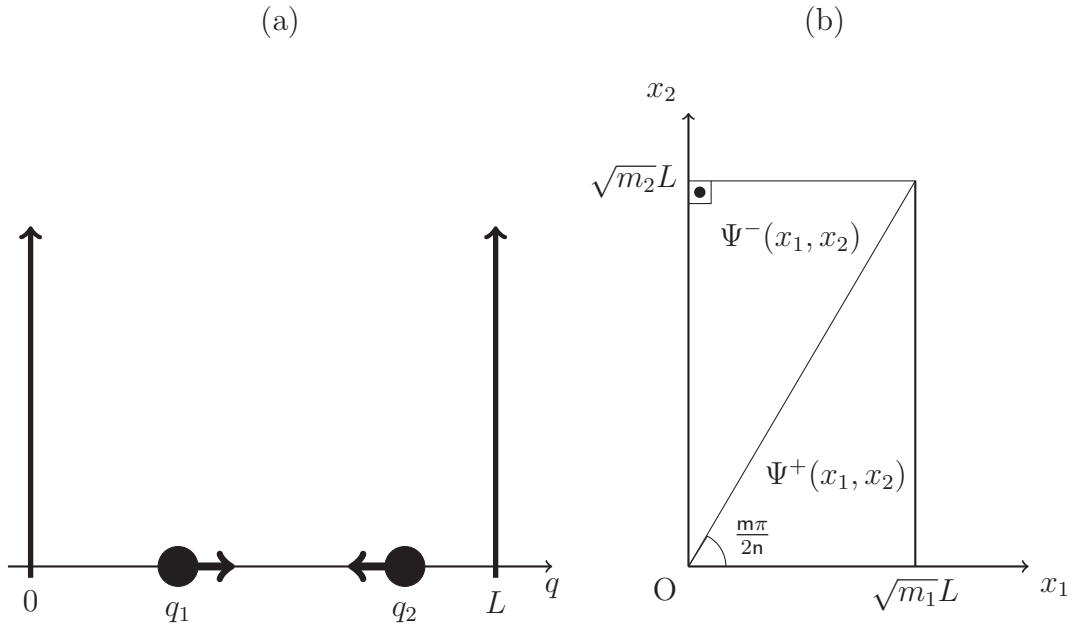


Figura 4.1: (a) Sistema quântico de duas partículas quaisquer confinadas em uma caixa 1D de comprimento L . Essas partículas interagem por um potencial $V(q_1, q_2) = \lambda\delta(q_1 - q_2)$, colidindo elasticamente ou tunelando entre si em $q_1 = q_2$. (b) Bilhar retangular correspondente ao sistema do item (a). A diagonal é uma parede permeável descrita pelo potencial $V(x) = 2\tilde{\lambda}\delta(x)$, correspondendo ao potencial de interação $V(q_1, q_2)$. $\Psi^-(x_1, x_2)$ e $\Psi^+(x_1, x_2)$ são as funções de onda para $x_1 \leq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}}$ e $x_1 \geq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}}$, respectivamente. O parâmetro $\frac{m\pi}{2n}$ é um dos ângulos agudos dos triângulos retângulos.

para $\frac{\theta}{\pi}$ racional, $l \in [1, n]$ e

$$a_l = 1 + \frac{i\tilde{\lambda}}{\alpha^{(l)} \sin \frac{\theta}{2} - \beta^{(l)} \cos \frac{\theta}{2}}. \quad (4.33)$$

Nesse caso, a expansão da função de onda tem $2n$ ondas planas; as $2n$ ondas planas restantes são obtidas trocando-se A_l por B_l , $a_l e^{i(\alpha^{(j)}x_1 + \beta^{(j)}x_2)}$ por $\bar{a}_l e^{i(-\alpha^{(j)}x_1 - \beta^{(j)}x_2)}$ e $\bar{a}_l e^{i(\alpha^{(j)}x_1 + \beta^{(j)}x_2)}$ por $a_l e^{i(-\alpha^{(j)}x_1 - \beta^{(j)}x_2)}$, em que $j \in \{l, \sigma\}$.

Definindo

$$\Psi(x_1, x_2) = \begin{Bmatrix} \Psi^-(x_1, x_2) \\ \Psi^+(x_1, x_2) \end{Bmatrix}$$

para

$$\Psi(x_1, x_2) = \begin{cases} \Psi^-(x_1, x_2), & x_1 \leq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}} \\ \Psi^+(x_1, x_2), & x_1 \geq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}} \end{cases},$$

a Eq. (4.32) expandida em $l \in [1, n]$ fica

$$\begin{aligned} \Psi(x_1, x_2) = \sum_{l=1}^n \left[A_l a_l \begin{Bmatrix} e^{\imath(\alpha^{(l)} x_1 + \beta^{(l)} x_2)} \\ e^{\imath(\alpha^{(\sigma)} x_1 + \beta^{(\sigma)} x_2)} \end{Bmatrix} + A_l \bar{a}_l \begin{Bmatrix} e^{\imath(\alpha^{(\sigma)} x_1 + \beta^{(\sigma)} x_2)} \\ e^{\imath(\alpha^{(l)} x_1 + \beta^{(l)} x_2)} \end{Bmatrix} \right. \\ \left. + B_l a_l \begin{Bmatrix} e^{\imath(-\alpha^{(\sigma)} x_1 - \beta^{(\sigma)} x_2)} \\ e^{\imath(-\alpha^{(l)} x_1 - \beta^{(l)} x_2)} \end{Bmatrix} + B_l \bar{a}_l \begin{Bmatrix} e^{\imath(-\alpha^{(l)} x_1 - \beta^{(l)} x_2)} \\ e^{\imath(-\alpha^{(\sigma)} x_1 - \beta^{(\sigma)} x_2)} \end{Bmatrix} \right], \end{aligned} \quad (4.34)$$

cujas expansões explícitas é

$$\begin{aligned} \Psi(x_1, x_2) = \sum_{l=1}^{m-1} \left[A_l a_l \begin{Bmatrix} e^{\imath(\alpha^{(l)} x_1 + \beta^{(l)} x_2)} \\ e^{\imath(-\alpha^{(n-m+l)} x_1 + \beta^{(n-m+l)} x_2)} \end{Bmatrix} + A_l \bar{a}_l \begin{Bmatrix} e^{\imath(-\alpha^{(n-m+l)} x_1 + \beta^{(n-m+l)} x_2)} \\ e^{\imath(\alpha^{(l)} x_1 + \beta^{(l)} x_2)} \end{Bmatrix} \right. \\ \left. + B_l a_l \begin{Bmatrix} e^{\imath(\alpha^{(n-m+l)} x_1 - \beta^{(n-m+l)} x_2)} \\ e^{\imath(-\alpha^{(l)} x_1 - \beta^{(l)} x_2)} \end{Bmatrix} + B_l \bar{a}_l \begin{Bmatrix} e^{\imath(-\alpha^{(l)} x_1 - \beta^{(l)} x_2)} \\ e^{\imath(\alpha^{(n-m+l)} x_1 - \beta^{(n-m+l)} x_2)} \end{Bmatrix} \right] + \\ + \sum_{l=m+1}^{n-1} \left[A_l a_l \begin{Bmatrix} e^{\imath(\alpha^{(l)} x_1 + \beta^{(l)} x_2)} \\ e^{\imath(\alpha^{(l-m)} x_1 - \beta^{(l-m)} x_2)} \end{Bmatrix} + A_l \bar{a}_l \begin{Bmatrix} e^{\imath(\alpha^{(l-m)} x_1 - \beta^{(l-m)} x_2)} \\ e^{\imath(\alpha^{(l)} x_1 + \beta^{(l)} x_2)} \end{Bmatrix} \right. \\ \left. + B_l a_l \begin{Bmatrix} e^{\imath(-\alpha^{(l-m)} x_1 + \beta^{(l-m)} x_2)} \\ e^{\imath(-\alpha^{(l)} x_1 - \beta^{(l)} x_2)} \end{Bmatrix} + B_l \bar{a}_l \begin{Bmatrix} e^{\imath(-\alpha^{(l)} x_1 - \beta^{(l)} x_2)} \\ e^{\imath(-\alpha^{(l-m)} x_1 + \beta^{(l-m)} x_2)} \end{Bmatrix} \right] + \\ + A_m a_m \begin{Bmatrix} e^{\imath(\alpha^{(m)} x_1 + \beta^{(m)} x_2)} \\ e^{\imath(\alpha^{(n)} x_1 + \beta^{(n)} x_2)} \end{Bmatrix} + A_m \bar{a}_m \begin{Bmatrix} e^{\imath(\alpha^{(n)} x_1 + \beta^{(n)} x_2)} \\ e^{\imath(\alpha^{(m)} x_1 + \beta^{(m)} x_2)} \end{Bmatrix} + \\ + B_m a_m \begin{Bmatrix} e^{\imath(-\alpha^{(n)} x_1 - \beta^{(n)} x_2)} \\ e^{\imath(-\alpha^{(m)} x_1 - \beta^{(m)} x_2)} \end{Bmatrix} + B_m \bar{a}_m \begin{Bmatrix} e^{\imath(-\alpha^{(m)} x_1 - \beta^{(m)} x_2)} \\ e^{\imath(-\alpha^{(n)} x_1 - \beta^{(n)} x_2)} \end{Bmatrix} + \\ + A_n a_n \begin{Bmatrix} e^{\imath(-\alpha^{(n)} x_1 + \beta^{(n)} x_2)} \\ e^{\imath(\alpha^{(n-m)} x_1 - \beta^{(n-m)} x_2)} \end{Bmatrix} + A_n \bar{a}_n \begin{Bmatrix} e^{\imath(\alpha^{(n-m)} x_1 - \beta^{(n-m)} x_2)} \\ e^{\imath(-\alpha^{(n)} x_1 + \beta^{(n)} x_2)} \end{Bmatrix} + \\ + B_n a_n \begin{Bmatrix} e^{\imath(-\alpha^{(n-m)} x_1 + \beta^{(n-m)} x_2)} \\ e^{\imath(\alpha^{(n)} x_1 - \beta^{(n)} x_2)} \end{Bmatrix} + B_n \bar{a}_n \begin{Bmatrix} e^{\imath(\alpha^{(n)} x_1 - \beta^{(n)} x_2)} \\ e^{\imath(-\alpha^{(n-m)} x_1 + \beta^{(n-m)} x_2)} \end{Bmatrix}, \end{aligned} \quad (4.35)$$

que é uma representação adequada para se verificar a continuidade da função de onda em $x_1 = \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}}$ na análise de casos particulares de valores de m e n .

No entanto, para se aplicar as condições de contorno de anulamento da função de onda nas paredes, reorganizamos as ondas planas da Eq. (4.34), expressando-a como uma superposição de ondas planas em um mesmo índice l , diferindo apenas em relação aos

sinais dos momentos das partículas,

$$\begin{aligned}
\Psi(x_1, x_2) = & \sum_{l=1}^{n-m} \left[A_l \begin{Bmatrix} a_l \\ \bar{a}_l \end{Bmatrix} e^{i(\alpha^{(l)}x_1 + \beta^{(l)}x_2)} + A_{l+m} \begin{Bmatrix} \bar{a}_{l+m} \\ a_{l+m} \end{Bmatrix} e^{i(\alpha^{(l)}x_1 - \beta^{(l)}x_2)} + \right. \\
& \left. + B_l \begin{Bmatrix} \bar{a}_l \\ a_l \end{Bmatrix} e^{i(-\alpha^{(l)}x_1 - \beta^{(l)}x_2)} + B_{l+m} \begin{Bmatrix} a_{l+m} \\ \bar{a}_{l+m} \end{Bmatrix} e^{i(-\alpha^{(l)}x_1 + \beta^{(l)}x_2)} \right] + \\
& + \sum_{l=n-m+1}^{n-1} \left[A_l \begin{Bmatrix} a_l \\ \bar{a}_l \end{Bmatrix} e^{i(\alpha^{(l)}x_1 + \beta^{(l)}x_2)} + A_{l-n+m} \begin{Bmatrix} \bar{a}_{l-n+m} \\ a_{l-n+m} \end{Bmatrix} e^{i(-\alpha^{(l)}x_1 + \beta^{(l)}x_2)} + \right. \\
& \left. + B_l \begin{Bmatrix} \bar{a}_l \\ a_l \end{Bmatrix} e^{i(-\alpha^{(l)}x_1 - \beta^{(l)}x_2)} + B_{l-1} \begin{Bmatrix} a_{l-n+m} \\ \bar{a}_{l-n+m} \end{Bmatrix} e^{i(\alpha^{(l)}x_1 - \beta^{(l)}x_2)} \right] + \\
& + A_n \begin{Bmatrix} a_n \\ \bar{a}_n \end{Bmatrix} e^{i(-\alpha^{(n)}x_1 + \beta^{(n)}x_2)} + A_m \begin{Bmatrix} \bar{a}_m \\ a_m \end{Bmatrix} e^{i(\alpha^{(n)}x_1 + \beta^{(n)}x_2)} + \\
& + B_m \begin{Bmatrix} a_m \\ \bar{a}_m \end{Bmatrix} e^{i(-\alpha^{(n)}x_1 - \beta^{(n)}x_2)} + B_n \begin{Bmatrix} \bar{a}_n \\ a_n \end{Bmatrix} e^{i(\alpha^{(n)}x_1 - \beta^{(n)}x_2)}. \tag{4.36}
\end{aligned}$$

Os coeficientes “ A ” e “ B ” devem ser determinados em termos dos coeficientes “ a ” a partir das condições de contorno $\Psi^-(0, x_2) = 0$ e $\Psi^+(x_1, 0) = 0$, como feito por M. Gaudin (consulte a seção 2.3). As condições $\Psi^-(x_1, \sqrt{m_2}L) = 0$ e $\Psi^+(\sqrt{m_1}L, x_2) = 0$ serão analisadas para os valores de γ já citados.

4.2.1 Análise das Condições $\Psi^-(0, x_2) = 0$ e $\Psi^+(x_1, 0) = 0$

A condição de contorno $\Psi^-(0, x_2) = 0$ leva-nos aos seguintes sistemas de equações:

$$\mathbf{S1} = \begin{cases} A_l a_l + B_{l+m} a_{l+m} = 0 \\ A_{l+m} \bar{a}_{l+m} + B_l \bar{a}_l = 0 \end{cases}, \quad l \in [1, n-m], \tag{4.37}$$

$$\mathbf{S2} = \begin{cases} A_l a_l + A_{l-n+m} \bar{a}_{l-n+m} = 0 \\ B_l \bar{a}_l + B_{l-n+m} a_{l-n+m} = 0 \end{cases}, \quad l \in [n-m+1, n-1], \tag{4.38}$$

$$\mathbf{S3} = \begin{cases} A_n a_n + A_m \bar{a}_m = 0 \\ B_m a_m + B_n \bar{a}_n = 0 \end{cases}, \quad l \in \{m, n\}, \tag{4.39}$$

assim como $\Psi^+(x_1, 0) = 0$ leva-nos aos sistemas de equações:

$$\mathbf{S4} = \begin{cases} A_l \bar{a}_l + A_{l+m} a_{l+m} = 0 \\ B_l a_l + B_{l+m} \bar{a}_{l+m} = 0 \end{cases}, \quad l \in [1, n-m], \quad (4.40)$$

$$\mathbf{S5} = \begin{cases} A_l \bar{a}_l + B_{l-n+m} \bar{a}_{l-n+m} = 0 \\ A_{l-n+m} a_{l-n+m} + B_l a_l = 0 \end{cases}, \quad l \in [n-m+1, n-1], \quad (4.41)$$

$$\mathbf{S6} = \begin{cases} A_n \bar{a}_n + B_m \bar{a}_m = 0 \\ A_m a_m + B_n a_n = 0 \end{cases}, \quad l \in \{m, n\}. \quad (4.42)$$

As equações acima são do tipo

$$A\mathbf{a} + B\mathbf{b} = 0, \quad (4.43)$$

cujas soluções mais simples é $A = \pm \mathbf{a}$ e $B = \mp \mathbf{b}$ (poderia ser também $A = \mp \mathbf{a}$ e $B = \pm \mathbf{b}$; porém, o importante é que A e B tenham sinais opostos). Essa solução é consistente, pois os coeficientes indeterminados devem ser escritos em termos dos coeficientes a_l , a_{l+m} e seus complexos conjugados. Sendo assim, as respectivas soluções são:

Solução da **S1**:

$$\begin{cases} A_l = \pm a_{l+m}, & B_{l+m} = \mp a_l \\ A_{l+m} = \pm \bar{a}_l, & B_l = \mp \bar{a}_{l+m} \end{cases}, \quad l \in [1, n-m], \quad (4.44)$$

Solução da **S2**:

$$\begin{cases} A_l = \pm \bar{a}_{l-n+m}, & A_{l-n+m} = \mp a_l \\ B_l = \pm a_{l-n+m}, & B_{l-n+m} = \mp \bar{a}_l \end{cases}, \quad l \in [n-m+1, n-1], \quad (4.45)$$

Solução da **S3**:

$$\begin{cases} A_n = \pm \bar{a}_m, & A_m = \mp a_n \\ B_m = \pm \bar{a}_n, & B_n = \mp a_m \end{cases}, \quad l \in \{m, n\} \quad (4.46)$$

e, de forma independente dessas três soluções, temos:

Solução da **S4**:

$$\begin{cases} A_l = \pm a_{l+m}, & A_{l+m} = \mp \bar{a}_l \\ B_l = \mp \bar{a}_{l+m}, & B_{l+m} = \pm a_l \end{cases}, \quad l \in [1, n-m], \quad (4.47)$$

Solução da **S5**:

$$\begin{cases} A_l = \pm \bar{a}_{l-n+m}, & B_{l-n+m} = \mp \bar{a}_l \\ A_{l-n+m} = \pm a_l, & B_l = \mp a_{l-n+m} \end{cases}, \quad l \in [n-m+1, n-1], \quad (4.48)$$

Solução da **S6**:

$$\begin{cases} A_n = \pm \bar{a}_m, & B_m = \mp \bar{a}_n \\ A_m = \pm a_n, & B_n = \mp a_m \end{cases}, \quad l \in \{m, n\}. \quad (4.49)$$

Comparando as soluções válidas em um mesmo intervalo, ou seja, **S1** e **S4**, **S2** e **S5**, **S3** e **S6**, observamos que elas são iguais, concordando com a simetria de reflexão contida na solução do tipo *Ansatz* de Bethe $\Psi(x_1, x_2)$, como discutido anteriormente. Por conseguinte, basta determinar os coeficientes apenas em um dos domínios $x_1 \leq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}}$ ou $x_1 \geq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}}$. Escolhemos o primeiro e, em vista disso, nos limitemos às soluções **S1**, **S2** e **S3**. É importante esclarecer que a ordem dos sinais mostradas nos coeficientes de mesmo índice, como A_l e B_l , não precisam ser necessariamente opostas. Por exemplo, na solução **S1**, os coeficientes são $A_l = \pm a_{l+m}$ e $B_l = \mp \bar{a}_{l+m}$; isto não significa que $A_l = \pm a_{l+m} \Rightarrow B_l = \mp \bar{a}_{l+m}$, podendo ser possível que $B_l = \pm \bar{a}_{l+m}$. Por isso, mencionamos anteriormente que os coeficientes “ B ” são, a menos de um sinal, o complexo conjugado de “ A ”. Portanto, é suficiente a análise dos “ A ” para se determinar todos os coeficientes da função de onda.

A Análise dos Coeficientes “ A ” da Eq. (4.36)

Analizamos os coeficientes “ A ” das Eqs. (4.44)-(4.46), dispondo esses coeficientes em uma lista, na qual cada uma das soluções **S1**, **S2** e **S3** são separadas por uma linha vertical

$A_l = \pm a_{l+m}$	$A_l = \pm \bar{a}_{l-n+m}$	$A_n = \pm \bar{a}_m$	(4.50)
$A_{l+m} = \pm \bar{a}_l$	$A_{l-n+m} = \pm a_l$	$A_m = \pm a_n$	
$l \in [1, n-m]$	$l \in [n-m+1, n-1]$	$l = n$	
$l+m \in [1+m, n]$	$l-n+m \in [1, m-1]$	$l = m$	
S1	S2	S3	

Como $m < n$, temos duas possibilidades: ou $m \leq n-m$, ou $m > n-m$, ou seja, $m \in [1, n-m]$ ou $m \in [n-m+1, n-1]$, o que significa que os resultados diferem conforme o domínio que o inteiro m estiver.

1) $m \in [1, n - m]$

Neste caso, m está no domínio das soluções **S1** sempre que $2m \leq n$. A lista¹ explícita dos coeficientes é

$$\begin{array}{cccccc} A_1 = a_{1+m} & \dots & A_m = a_{2m} & A_{m+1} = a_{2m+1} & \dots & A_{n-m} = a_n \\ A_{1+m} = \bar{a}_1 & \dots & A_{2m} = \bar{a}_m & A_{2m+1} = \bar{a}_{m+1} & \dots & A_n = \bar{a}_{n-m} \end{array} \left| \begin{array}{l} A_{n-m+1} = \bar{a}_1 \quad \dots \quad A_{n-1} = \bar{a}_{m-1} \\ A_1 = a_{n-m+1} \quad \dots \quad A_{m-1} = a_{n-1} \end{array} \right. \begin{array}{l} A_n = \bar{a}_m \\ A_m = a_n \end{array} \quad (4.51)$$

Os sinais dos coeficientes estão omitidos por uma questão de simplicidade de notação.

A lista acima revela que há coeficientes “ A ” de mesmo índice nas duas linhas, mas iguais a coeficientes “ a ” diferentes. Isso compromete a solução base dada pela Eq. (4.32), no qual o “ A ” é o mesmo para o par de ondas planas incidente e espalhada, uma consequência da suposição de separabilidade da função de onda $\Psi(x_1, x_2) = \phi(X)\varphi(x)$. Para resolver esse problema, supomos que “ A ” seja o produto desses dois coeficientes “ a ” diferentes.

No caso **S1**, há m coeficientes da primeira linha que correspondem a m coeficientes da segunda linha em **S2** e **S3**: conforme (4.50), os coeficientes da primeira linha são $A_l = a_{l+m}$ e da segunda linha, em **S2**, é $A_{l'-n+m} = a_{l'}$. Para que $A_l = A_{l'-n+m}$, devemos ter que $l' = l + n - m$; assim, $A_{l'-n+m} = a_{l+n-m}$. Ora, como $a_{l+m} \neq a_{l+n-m}$, redefinimos $A_l = a_{l+m}a_{l+n-m}$, com $l \in [1, m-1]$. O coeficiente da primeira linha $A_m = a_{2m}$ corresponde ao $A_m = a_n$ da segunda linha em **S3**. Logo, $A_m = a_{2m}a_n$.

Resta, então, $n - m$ coeficientes da primeira e segunda linha em **S1**: seja $A_l = a_{l+m}$ o coeficiente da primeira linha e $A_{l'+m} = a_{l'}$ o coeficiente da segunda linha; para que $A_l = A_{l'+m}$, devemos ter $l' = l - m$, de modo que $A_{l'+m} = a_{l-m}$. Como $a_{l-m} \neq a_{l+m}$, redefinimos $A_l = a_{l+m}a_{l-m}$.

Com raciocínio análogo, no qual toma-se dois coeficientes quaisquer de linhas diferentes, impondo a igualdade dos seus índices, obtemos os coeficientes A_l da primeira linha em **S2** e **S3**. O resultado geral, com os sinais explícitos, são

$$A_l = \begin{cases} \pm a_{l+m}a_{l+n-m}, & l \in [1, m] \\ \pm a_{l+m}\bar{a}_{l-m}, & l \in [m+1, n-m] \\ \pm \bar{a}_{l+m-n}\bar{a}_{l-m}, & l \in [n-m+1, n-1] \\ \pm \bar{a}_m\bar{a}_{n-m}, & l \in \{n\} \end{cases}. \quad (4.52)$$

¹Como não há espaço suficiente, foi necessário dividir a lista em duas partes, uma superior e outra inferior.

De maneira análoga, obtemos os coeficientes da segunda linha procurando os coeficientes correspondentes da primeira linha,

$$A_{l+m} = \begin{cases} \pm a_{l+2m} \bar{a}_l, & l \in [1, n-2m] \\ \pm \bar{a}_{l+2m-n} \bar{a}_l, & l \in [n-2m+1, n-m] \end{cases}, \quad (4.53)$$

$$A_{l-n+m} = \pm a_l a_{l-n+2m}, \quad l \in [1+n-m, n]. \quad (4.54)$$

2) $m \in [n-m+1, n-1] \cup \{n\}$

Neste intervalo, o inteiro m está no domínio das soluções **S2** sempre que $2m > n$. A lista explícita dos coeficientes é

$$\left. \begin{array}{l} A_1 = a_{1+m} \quad \dots \quad A_{n-m} = a_n \\ A_{1+m} = \bar{a}_1 \quad \dots \quad A_n = \bar{a}_{n-m} \end{array} \right|$$

$$\left. \begin{array}{l} A_{n-m+1} = \bar{a}_1 \quad \dots \quad A_m = \bar{a}_{2m-n} \quad \dots \quad A_{n-1} = \bar{a}_{m-1} \\ A_1 = a_{n-m+1} \quad \dots \quad A_{2m-n} = a_m \quad \dots \quad A_{m-1} = a_{n-1} \end{array} \right| \begin{array}{l} A_n = \bar{a}_m \\ A_m = a_n \end{array}$$

Com o mesmo raciocínio do item 1), obtemos

$$A_l = \begin{cases} \pm a_{l+m} a_{l+n-m}, & l \in [1, n-m] \\ \pm \bar{a}_{l-n+m} a_{l+n-m}, & l \in [n-m+1, m-1] \cup \{m\} \\ \pm \bar{a}_{l-n+m} \bar{a}_{l-m}, & l \in [m+1, n-1] \cup \{n\} \end{cases}, \quad (4.55)$$

$$A_{l-n+m} = \begin{cases} \pm a_l a_{l-n+2m}, & l-n+m \in [1, n-m] \\ \pm a_l \bar{a}_{l-2(n-m)}, & l-n+m \in [n-m+1, m-1] \end{cases}, \quad (4.56)$$

$$A_{l+m} = \pm \bar{a}_l \bar{a}_{l+2m-n}, \quad l \in [1, n-m]. \quad (4.57)$$

Esses coeficientes possuem uma arbitrariedade de sinais. Em princípio, para fixá-los, usamos o seguinte critério:

Critério do Limite (CL): A função de onda de um bilhar retangular com parede permeável em sua diagonal se reduz à função de onda de um bilhar triângulo retângulo no limite infinito da intensidade do potencial.

Para se aplicar esse critério, é necessário conhecer analiticamente a função de onda para bilhares triângulo retângulo, o que não representa dificuldade para aqueles que são

integráveis. No entanto, esse não é o caso para bilhares triângulo retângulo pseudointegráveis, pois não há uma função de onda do tipo *Ansatz* de Bethe para eles, impedindo a aplicabilidade do **CL**. Na seção 4.2.6, discutimos os detalhes dessas restrições, relacionadas com a arbitrariedade dos sinais dos coeficientes e a impossibilidade de se ter uma condição de quantização consistente.

Uma vez que os sinais dos coeficientes estão estabelecidos, é preciso verificar se o anulamento da função de onda nas paredes está mantido, pois os coeficientes A_l foram modificados. Caso não seja, os coeficientes “ A ” e “ B ” devem ser reexpressos em termos de outros coeficientes “ a ” na tentativa da função de onda se anular nas paredes. A continuidade da função de onda é garantida em $x_1 = \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}}$, contanto que os A_l modificados estejam de acordo com a Eq. (4.35).

Nas próximas seções, aplicamos esses resultados para dois casos integráveis, $\gamma = 1$ e $\gamma = 3$, e para o caso pseudointegrável, $\gamma = \frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}-1}$, no qual mostramos como deveria ser a função de onda se ignorássemos as restrições mencionadas acima.

4.2.2 Função de Onda para $\gamma = 1$

Este caso corresponde ao bilhar quadrado com uma parede permeável em sua diagonal, ou seja, é formado por dois triângulos retângulos isósceles classicamente integráveis. Como $\gamma = 1$, segue-se que $m = 1$ e $n = 2$. Substituindo esses valores na Eq. (3.23), obtemos os momentos normalizados das partículas,

$$\alpha^{(1)} = \alpha, \quad \beta^{(1)} = \beta, \quad \alpha^{(2)} = \beta, \quad \beta^{(2)} = \alpha,$$

em que $0 < \beta < \alpha$. Substituindo esses inteiros na Eq. (4.36), a função de onda correspondente é

$$\begin{aligned} \Psi(x_1, x_2) = & A_1 \begin{Bmatrix} a_1 \\ \bar{a}_1 \end{Bmatrix} e^{i(\alpha x_1 + \beta x_2)} + A_2 \begin{Bmatrix} \bar{a}_2 \\ a_2 \end{Bmatrix} e^{i(\alpha x_1 - \beta x_2)} + \\ & + B_1 \begin{Bmatrix} \bar{a}_1 \\ a_1 \end{Bmatrix} e^{i(-\alpha x_1 - \beta x_2)} + B_2 \begin{Bmatrix} a_2 \\ \bar{a}_2 \end{Bmatrix} e^{i(-\alpha x_1 + \beta x_2)} + \\ & + A_2 \begin{Bmatrix} a_2 \\ \bar{a}_2 \end{Bmatrix} e^{i(-\beta x_1 + \alpha x_2)} + A_1 \begin{Bmatrix} \bar{a}_1 \\ a_1 \end{Bmatrix} e^{i(\beta x_1 + \alpha x_2)} + \end{aligned}$$

$$+ B_1 \begin{Bmatrix} a_1 \\ \bar{a}_1 \end{Bmatrix} e^{i(-\beta x_1 - \alpha x_2)} + B_2 \begin{Bmatrix} \bar{a}_2 \\ a_2 \end{Bmatrix} e^{i(\beta x_1 - \alpha x_2)}, \quad (4.58)$$

em que $\sum_{l=n-m+1}^{n-1} [\dots] = \sum_{l=n}^{n-1} [\dots] = 0$. Esse resultado é coerente com o fato de o conjunto de soluções **S2** não existir, pois o domínio de l é $[n, n-1] = \emptyset$, ou seja, para todos os casos em que $m = 1$, a expansão da função de onda é mais simples.

Como mencionado anteriormente, o coeficiente “ A ” é igual a dois coeficientes “ a ” diferentes no mínimo, um de cada linha da lista e os coeficientes podem ser determinados (parcialmente) pelas Eqs. (4.52)-(4.54); no entanto, isso não acontece para $n = 2$: conforme o critério $2m \leq n$, a lista adequada é a (4.51), de modo que

$$\begin{array}{l|l} A_1 = \pm a_2 & A_2 = \pm \bar{a}_1 \\ A_2 = \pm \bar{a}_1 & A_1 = \pm a_2 \end{array} \quad (4.59)$$

ou seja, um dado “ A ” é igual a um mesmo “ a ”, não importando a linha da lista que ele esteja. Consequentemente, a solução base da função de onda, Eq. (4.32), é preservada, como deveria ser.

Pelos coeficientes $A_1 = \pm a_2$ e $A_2 = \pm \bar{a}_1$, obtemos $B_1 = \pm \bar{a}_2$ e $B_2 = \pm a_1$. Em vista da ambiguidade de sinais, usamos o **CL** para fixá-los: para $\tilde{\lambda} \rightarrow \infty$, a função de onda acima deve se reduzir àquela de um bilhar triângulo retângulo isósceles (tri) [134],

$$\Psi_{\text{tri}}(x_1, x_2) = -4 \left(\sin(\alpha x_1) \sin(\beta x_2) - \sin(\beta x_1) \sin(\alpha x_2) \right),$$

em que $\alpha = \frac{r\pi}{\sqrt{m}L}$ e $\beta = \frac{s\pi}{\sqrt{m}L}$, $r \neq s$.

Colocando em evidência o fator $A_1 a_1$ na Eq. (4.58), temos que $\lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{\Psi^-(x_1, x_2)}{A_1 a_1} = \Psi_{\text{tri}}(x_1, x_2)$, contanto que

$$\lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{A_2 \bar{a}_2}{A_1 a_1} = \lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{B_2 a_2}{A_1 a_1} = -1, \quad (4.60)$$

$$\lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{B_1 \bar{a}_1}{A_1 a_1} = 1, \quad (4.61)$$

$$\lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{A_2 a_2}{A_1 a_1} = \lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{B_2 \bar{a}_2}{A_1 a_1} = -1, \quad (4.62)$$

$$\lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{B_1}{A_1} = \lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{\bar{a}_1}{a_1} = -1. \quad (4.63)$$

Logo,

$$\Psi(x_1, x_2) \stackrel{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty}{=} \left\{ \begin{array}{c} -4 \left(\sin(\alpha x_1) \sin(\beta x_2) - \sin(\beta x_1) \sin(\alpha x_2) \right) \\ 4 \left(\sin(\alpha x_1) \sin(\beta x_2) - \sin(\beta x_1) \sin(\alpha x_2) \right) \end{array} \right\}.$$

Considerando $A_1 = a_2$, para que os limites das Eqs. (4.60)-(4.63) sejam satisfeitos, deve-se ter $A_2 = -\bar{a}_1$, $B_1 = \bar{a}_2$ e $B_2 = -a_1$. Assim, temos a seguinte expressão para a função de onda,

$$\begin{aligned} \Psi(x_1, x_2) = & \left\{ \begin{array}{c} a_2 a_1 \\ a_2 \bar{a}_1 \end{array} \right\} e^{i(\alpha x_1 + \beta x_2)} + \left\{ \begin{array}{c} -\bar{a}_1 \bar{a}_2 \\ -\bar{a}_1 a_2 \end{array} \right\} e^{i(\alpha x_1 - \beta x_2)} + \\ & + \left\{ \begin{array}{c} \bar{a}_2 \bar{a}_1 \\ \bar{a}_2 a_1 \end{array} \right\} e^{i(-\alpha x_1 - \beta x_2)} + \left\{ \begin{array}{c} -a_1 a_2 \\ -a_1 \bar{a}_2 \end{array} \right\} e^{i(-\alpha x_1 + \beta x_2)} + \\ & + \left\{ \begin{array}{c} -\bar{a}_1 a_2 \\ -\bar{a}_1 \bar{a}_2 \end{array} \right\} e^{i(-\beta x_1 + \alpha x_2)} + \left\{ \begin{array}{c} a_2 \bar{a}_1 \\ a_2 a_1 \end{array} \right\} e^{i(\beta x_1 + \alpha x_2)} + \\ & + \left\{ \begin{array}{c} \bar{a}_2 a_1 \\ \bar{a}_2 \bar{a}_1 \end{array} \right\} e^{i(-\beta x_1 - \alpha x_2)} + \left\{ \begin{array}{c} -a_1 \bar{a}_2 \\ -a_1 a_2 \end{array} \right\} e^{i(\beta x_1 - \alpha x_2)}. \end{aligned} \quad (4.64)$$

Perceba que, de fato, $\Psi^-(0, x_2) = \Psi^+(x_1, 0) = 0$. Além disso, verificamos a preservação da continuidade da função de onda, com a substituição dos coeficientes A_i e B_i na Eq. (4.35),

$$\begin{aligned} \Psi(x_1, x_2) = & \left\{ \begin{array}{c} (a_2 a_1) e^{i(\alpha x_1 + \beta x_2)} \\ (a_2 a_1) e^{i(\beta x_1 + \alpha x_2)} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{c} (a_2 \bar{a}_1) e^{i(\beta x_1 + \alpha x_2)} \\ (a_2 \bar{a}_1) e^{i(\alpha x_1 + \beta x_2)} \end{array} \right\} + \\ & + \left\{ \begin{array}{c} (\bar{a}_2 a_1) e^{i(-\beta x_1 - \alpha x_2)} \\ (\bar{a}_2 a_1) e^{i(-\alpha x_1 - \beta x_2)} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{c} (\bar{a}_2 \bar{a}_1) e^{i(-\alpha x_1 - \beta x_2)} \\ (\bar{a}_2 \bar{a}_1) e^{i(-\beta x_1 - \alpha x_2)} \end{array} \right\} + \\ & + \left\{ \begin{array}{c} (-\bar{a}_1 a_2) e^{i(-\beta x_1 + \alpha x_2)} \\ (-\bar{a}_1 a_2) e^{i(\alpha x_1 - \beta x_2)} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{c} (-\bar{a}_1 \bar{a}_2) e^{i(\alpha x_1 - \beta x_2)} \\ (-\bar{a}_1 \bar{a}_2) e^{i(-\beta x_1 + \alpha x_2)} \end{array} \right\} + \\ & + \left\{ \begin{array}{c} (-a_1 a_2) e^{i(-\alpha x_1 + \beta x_2)} \\ (-a_1 a_2) e^{i(\beta x_1 - \alpha x_2)} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{c} (-a_1 \bar{a}_2) e^{i(\beta x_1 - \alpha x_2)} \\ (-a_1 \bar{a}_2) e^{i(-\alpha x_1 + \beta x_2)} \end{array} \right\}, \end{aligned}$$

na qual os termos entre parênteses são iguais para cada onda plana de $\Psi^-(x_1, x_2)$ e $\Psi^+(x_1, x_2)$, ou seja, $\Psi^-(x_1, x_1) = \Psi^+(x_1, x_1)$.

Aplicando as condições de contorno $\Psi^-(x_1, \sqrt{m}L) = 0$ e $\Psi^+(\sqrt{m}L, x_2) = 0$ na Eq. (4.64), obtemos as equações de Bethe

$$e^{i2\alpha\sqrt{m}L} = \frac{a_1 \bar{a}_2}{\bar{a}_1 a_2}, \quad e^{i2\beta\sqrt{m}L} = \frac{\bar{a}_1 \bar{a}_2}{a_1 a_2}. \quad (4.65)$$

Sendo $e^{i2\beta^{(l)}\sqrt{m}L} = e^{i(2\beta^{(l)}\sqrt{m}L - 2r^{(l)}\pi)}$, com $r^{(l)}$ um inteiro, e $\arctg(\Upsilon) = \frac{i}{2} \ln \frac{1-i\Upsilon}{1+i\Upsilon}$, resolvemos as equações de Bethe, para termos a quantização sobre os $\beta^{(l)}$,

$$\beta^{(l)}\sqrt{m}L = r^{(l)}\pi + \arctg\left(\frac{\hat{\lambda}}{\beta^{(l)} - \alpha^{(l)}}\right) + \arctg\left(\frac{\hat{\lambda}}{\beta^{(l)} + \alpha^{(l)}}\right), \quad (4.66)$$

em que $\hat{\lambda} = \tilde{\lambda}\sqrt{2}$, $r^{(1)} = \mathbf{s}$ e $r^{(2)} = \mathbf{r}$. Essa equação é compatível com a Eq. (2.34) e, por conseguinte, com os autovalores de energia. Por ser uma equação transcendental, esses autovalores são determinados apenas numericamente.

De posse agora da função de onda e das condições de quantização para o bilhar quadrado com parede permeável em sua diagonal, podemos recuperar a função de onda para o bilhar triângulo retângulo isósceles, como um tipo de “prova real”²: aplicando o limite $\tilde{\lambda} \rightarrow \infty$ nas Eqs. (4.65) e na Eq. (4.64), temos

$$\alpha = \frac{\mathbf{r}\pi}{\sqrt{m}L}, \quad \beta = \frac{\mathbf{s}\pi}{\sqrt{m}L},$$

e

$$\Psi^-(x_1, x_2) = -4 \left[\sin\left(\frac{\mathbf{r}\pi}{\sqrt{m}L}x_1\right) \sin\left(\frac{\mathbf{s}\pi}{\sqrt{m}L}x_2\right) - \sin\left(\frac{\mathbf{s}\pi}{\sqrt{m}L}x_1\right) \sin\left(\frac{\mathbf{r}\pi}{\sqrt{m}L}x_2\right) \right], \quad (4.67)$$

em que $\lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{\Psi^-(x_1, x_2)}{A_1 a_1} := \Psi^-(x_1, x_2)$ finito.

A substituição da Eq. (4.67) na equação de Schrödinger,

$$-\frac{\partial^2 \Psi(x_1, x_2)}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2 \Psi(x_1, x_2)}{\partial x_2^2} = \mathcal{E} \Psi(x_1, x_2), \quad (4.68)$$

fornece os autovalores de energia

$$\mathcal{E}_{\mathbf{rs}} = \frac{\pi^2}{mL^2}(\mathbf{r}^2 + \mathbf{s}^2). \quad (4.69)$$

As Eqs. (4.67) e (4.69) concordam com a função de onda e os autovalores de energia determinados por H. C. Schachner e G. M. Obermair em [134]. Além disso, a Eq. (4.69) mostra que o quadrado dos números quânticos são comensuráveis entre si, ou seja, temos explicitamente um caso demonstrando a inexistência da constante \mathbf{c} irracional da Eq. (2.6), ou seja, é previsível que a distribuição dos níveis de energia próximos não siga uma distribuição Poisson, como discutido na subseção 2.1.4.

²Remete-se aqui à prova real usada em operações aritméticas, nas quais usa-se uma operação aritmética contrária para verificar o resultado da operação original.

Tendo em vista a Eq. (4.67), podemos expressar a Eq. (4.64) em termos de funções seno; para isso, basta inserir as Eqs. (4.65) em (4.64),

$$\Psi(x_1, x_2) = -4 \left\{ \begin{array}{l} (a_1 \bar{a}_2) e^{i\beta \sqrt{m}L} \sin(\alpha x_1) \sin[\beta(x_2 - \sqrt{m}L)] + \\ \quad + (\bar{a}_1 \bar{a}_2) e^{i\alpha \sqrt{m}L} \sin(\beta x_1) \sin[\alpha(x_2 - \sqrt{m}L)] \\ (a_1 \bar{a}_2) e^{i\beta \sqrt{m}L} \sin[\beta(x_1 - \sqrt{m}L)] \sin(\alpha x_2) + \\ \quad + (\bar{a}_1 \bar{a}_2) e^{i\alpha \sqrt{m}L} \sin[\alpha(x_1 - \sqrt{m}L)] \sin(\beta x_2) \end{array} \right\},$$

a qual preserva a simetria da função de onda, $\Psi^+(x_2, x_1) = \Psi^-(x_1, x_2)$, da Eq. (4.64) (os termos deslocados à direita pertencem a mesma linha do termo posicionado à esquerda). Essa forma alternativa é interessante por ser mais compacta e apresentar uma semelhança visual com a função de onda do bilhar triângulo retângulo isósceles.

Outra situação importante ocorre quando não há mais a parede permeável na diagonal do quadrado, no qual $\tilde{\lambda} = 0$; consequentemente, de acordo com a Eq. (4.33), todos os coeficientes das ondas planas reduzem-se a 1 e a função de onda da Eq. (4.64) torna-se

$$\Psi(x_1, x_2) = -4 \left(\sin(\alpha x_1) \sin(\beta x_2) + \sin(\beta x_1) \sin(\alpha x_2) \right), \quad (4.70)$$

em que $\alpha = \frac{r\pi}{\sqrt{m}L}$ e $\beta = \frac{s\pi}{\sqrt{m}L}$, com $r \neq s$, conforme a Eq. (4.66). Também notamos que a solução típica de um bilhar retangular tem a forma $\sin(\alpha x_1) \sin(\beta x_2)$, ao passo que, na Eq. (4.70), temos dois termos nesta forma. Isto se dá porque temos maior interesse em $\lambda \neq 0$ e, por isso, não usamos os termos de base que são antissimétricos (veja a Eq. (4.16)). Ao incluí-los, recuperamos corretamente a solução tradicional (veja a discussão no final da seção 4.2.2).

A Fig. 4.2 ilustra o perfil da densidade de probabilidade $|\Psi(x_1, x_2)|^2$ para seis valores diferentes de $\hat{\lambda}$ e para um par específico de números quânticos $(r, s) = (2, 3)$. Quanto mais clara estiver uma região no bilhar, mais provável será encontrar a partícula nessa região. A Fig. 4.2(a) exemplifica a $|\Psi(x_1, x_2)|^2$ obtida da Eq. (4.70), na qual observamos que é mais provável encontrar a partícula nas proximidades dos vértices opostos da diagonal do quadrado, onde havia a parede permeável. A esses máximos, chamamos de máximos principais. Há também as regiões menos claras, que chamamos aqui de máximos secundários. À medida que se aumenta a intensidade do potencial, as Figs. 4.2(a)-(f) mostram que os máximos principais separam-se simetricamente e esmaecem; ao mesmo tempo, as regiões menos claras tornam-se mais claras, ou seja, a densidade de probabilidade aumenta nessas regiões dos máximos secundários. No entanto, os máximos secundários não se tornam máximos principais e os principais, em secundários. O que se observa na Fig. 4.2(f) é

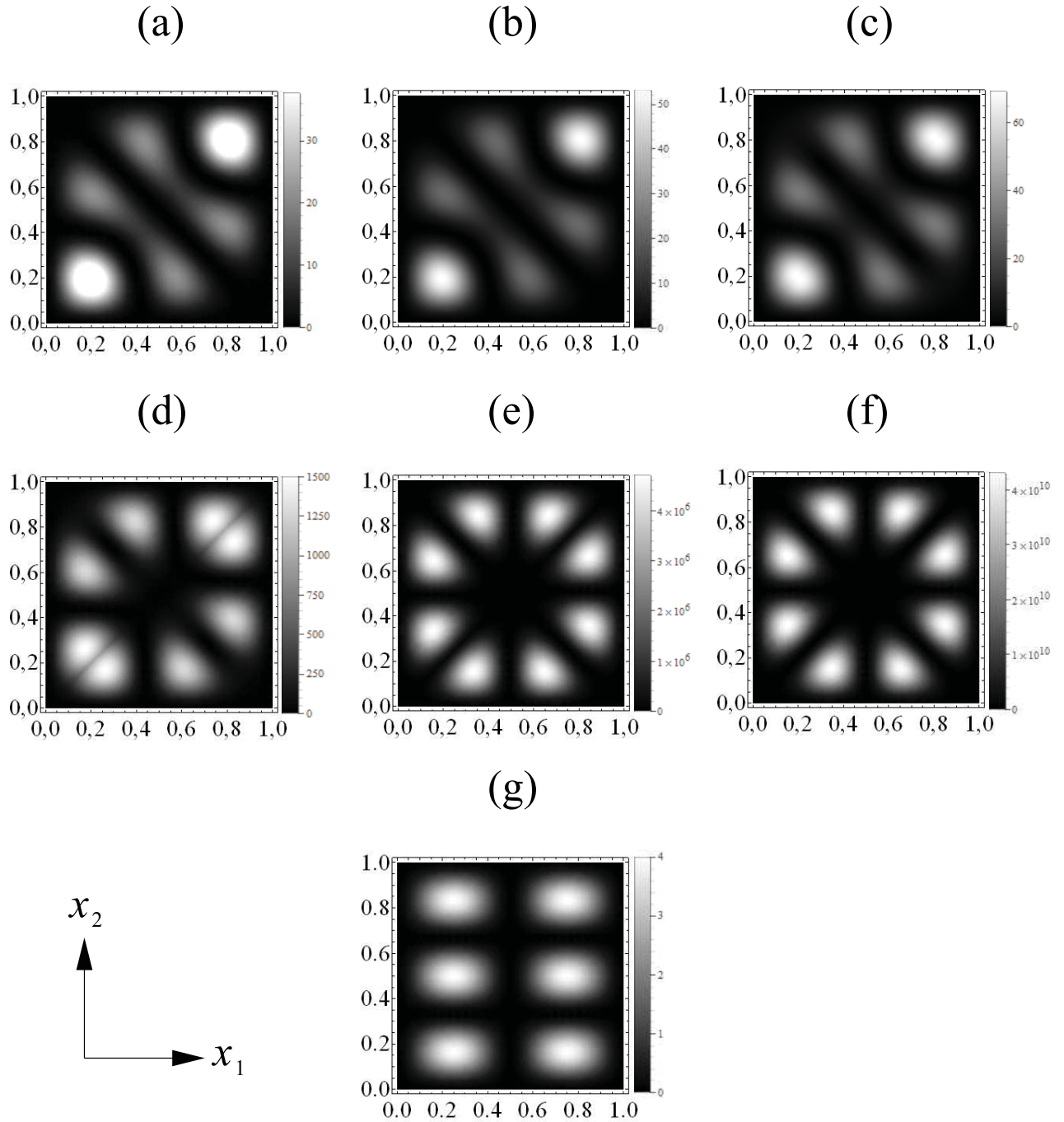


Figura 4.2: Gráficos das densidades de probabilidade $|\Psi(x_1, x_2)|^2$ não normalizadas para um bilhar quadrado de lados unitários e com uma parede permeável na diagonal em $x_2 = x_1$. Para um par de números quânticos $(r, s) = (2, 3)$, ilustramos $|\Psi(x_1, x_2)|^2$ em função do valor da intensidade do potencial: (a) $\hat{\lambda} = 0$; (b) $\hat{\lambda} = 0, 1$; (c) $\hat{\lambda} = 1$; (d) $\hat{\lambda} = 10$; (e) $\hat{\lambda} = 100$; (f) $\hat{\lambda} = 1000$; (g) $\hat{\lambda} = 0$ (veja texto).

uma tendência dos máximos de probabilidade terem a mesma amplitude. A região escura nesses gráficos, principalmente ao longo da diagonal do quadrado, não é necessariamente nula, pois a permeabilidade da parede é finita. Isso acontece porque a amplitude da função de onda na diagonal é muito menor que a amplitude dos máximos visíveis (regiões

claras). Apenas no limite $\tilde{\lambda} \rightarrow \infty$ a amplitude na diagonal será nula e a morfologia da função de onda será de dois bilhares triângulo retângulo isósceles.

A Fig. 4.2(g) mostra a densidade de probabilidade da função de onda para o quadrado, com os mesmos números quânticos $(r, s) = (2, 3)$. Ora, a Fig. 4.2(a) também é a representação de uma função de onda para o quadrado, pois $\hat{\lambda} = 0$. Para entender essa diferença, lembremos que a Eq. (4.70) é o resultado da descrição do problema de duas partículas interagentes por um potencial delta de Dirac; sendo assim, o problema é não separável, no sentido que $\Psi(x_1, x_2) \neq \Psi_1(x_1)\Psi_2(x_2)$; em vez disso, supomos que $\Psi(x_1, x_2)$ é o produto entre uma função de onda na coordenada do centro de massa e uma na coordenada relativa. A função de onda completa, então, é a superposição de todas as ondas planas associadas aos momentos gerados pela interação. No caso de massas iguais, há apenas duas possibilidades de troca de momentos, correspondendo a uma simples permutação, levando a uma função de onda simétrica. Para o caso de partículas não interagentes, a função de onda continua sendo simétrica, como dada pela Eq. (4.70). Isso concorda com a indistinguibilidade de bósons idênticos [177]. Por outro lado, a função de onda da Fig. 4.2(g) é obtida do problema quântico de uma partícula confinada em uma caixa 2D quadrada, que é um problema separável $\psi(x_1, x_2) = \psi_1(x_1)\psi_2(x_2)$ [178], o qual, para o nosso caso específico, é

$$\psi(x_1, x_2) = C \sin(2x_1) \sin(3x_2), \quad (4.71)$$

em que C é uma constante de normalização. Desse modo, interpretando esse problema como equivalente a de duas partículas não interagentes em 1D, essa solução está desconsiderando a indistinguibilidade de partículas quânticas. Ainda assim, a Eq. (4.71) pode ser obtida da Eq. (4.70) acrescentando-se a solução antissimétrica

$$\Psi_a(x_1, x_2) = -4 \left(\sin(\alpha x_1) \sin(\beta x_2) - \sin(\beta x_1) \sin(\alpha x_2) \right),$$

em que $\Psi_a(x_1, x_2) = \varphi_a(x)\phi(X)$, com $\varphi_a(x)$ e $\phi(X)$ dada pelas Eqs. (4.16) e (4.18).

Portanto, como obtemos a função de onda contínua e anulando-se nas paredes em ambos os domínios, temos a solução completa por *Ansatz* de Bethe para o bilhar quadrado com parede permeável.

4.2.3 Função de Onda para $\gamma = 3$

O bilhar correspondente é um retângulo com parede permeável, com $0 \leq x_1 \leq 1L$ e $0 \leq x_2 \leq \sqrt{3}L$ (veja a Fig. 4.1(b)). Para este caso, $m = 2$ e $n = 3$, e a função de onda é

$$\begin{aligned}
\Psi(x_1, x_2) = & A_1 \begin{Bmatrix} a_1 \\ \bar{a}_1 \end{Bmatrix} e^{i(\alpha^{(1)}x_1 + \beta^{(1)}x_2)} + A_3 \begin{Bmatrix} \bar{a}_3 \\ a_3 \end{Bmatrix} e^{i(\alpha^{(1)}x_1 - \beta^{(1)}x_2)} + \\
& + B_1 \begin{Bmatrix} \bar{a}_1 \\ a_1 \end{Bmatrix} e^{i(-\alpha^{(1)}x_1 - \beta^{(1)}x_2)} + B_3 \begin{Bmatrix} a_3 \\ \bar{a}_3 \end{Bmatrix} e^{i(-\alpha^{(1)}x_1 + \beta^{(1)}x_2)} + \\
& + A_2 \begin{Bmatrix} a_2 \\ \bar{a}_2 \end{Bmatrix} e^{i(\alpha^{(2)}x_1 + \beta^{(2)}x_2)} + A_1 \begin{Bmatrix} \bar{a}_1 \\ a_1 \end{Bmatrix} e^{i(-\alpha^{(2)}x_1 + \beta^{(2)}x_2)} + \\
& + B_2 \begin{Bmatrix} \bar{a}_2 \\ a_2 \end{Bmatrix} e^{i(-\alpha^{(2)}x_1 - \beta^{(2)}x_2)} + B_1 \begin{Bmatrix} a_1 \\ \bar{a}_1 \end{Bmatrix} e^{i(\alpha^{(2)}x_1 - \beta^{(2)}x_2)} + \\
& + A_3 \begin{Bmatrix} a_3 \\ \bar{a}_3 \end{Bmatrix} e^{i(-\alpha^{(3)}x_1 + \beta^{(3)}x_2)} + A_2 \begin{Bmatrix} \bar{a}_2 \\ a_2 \end{Bmatrix} e^{i(\alpha^{(3)}x_1 + \beta^{(3)}x_2)} + \\
& + B_2 \begin{Bmatrix} a_2 \\ \bar{a}_2 \end{Bmatrix} e^{i(-\alpha^{(3)}x_1 - \beta^{(3)}x_2)} + B_3 \begin{Bmatrix} \bar{a}_3 \\ a_3 \end{Bmatrix} e^{i(\alpha^{(3)}x_1 - \beta^{(3)}x_2)}, \tag{4.72}
\end{aligned}$$

em que, pela Eq. (3.23),

$$\alpha^{(1)} = \alpha, \quad \beta^{(1)} = \beta, \tag{4.73}$$

$$\alpha^{(2)} = \frac{\alpha - \sqrt{3}\beta}{2}, \quad \beta^{(2)} = \frac{\sqrt{3}\alpha + \beta}{2}, \tag{4.74}$$

$$\alpha^{(3)} = \frac{\alpha + \sqrt{3}\beta}{2}, \quad \beta^{(3)} = \frac{\sqrt{3}\alpha - \beta}{2}. \tag{4.75}$$

Como os inteiros $m = 2$ e $n = 3$ satisfazem o critério $2m > n$, os coeficientes “ A ” são determinados pelas Eqs. (4.55)-(4.57), dando

$$A_1 = \pm a_2 a_3, \quad A_2 = \pm \bar{a}_1 a_3, \quad A_3 = \pm \bar{a}_1 \bar{a}_2,$$

e consequentemente,

$$B_1 = \pm \bar{a}_2 \bar{a}_3, \quad B_2 = \pm a_1 \bar{a}_3, \quad B_3 = \pm a_1 a_2.$$

Observação: Note que alguns intervalos de l das Eqs. (4.55) e (4.56) são vazios para o nosso caso particular, pois $[n-m+1, m-1] = [2, 1]$, $[m+1, n-1] = [3, 2]$ e $[n-m+1, m-1] =$

$[2, 1]$. Logo, $[n - m + 1, m - 1] \cup \{m\} = \{m\}$ e $[m + 1, n - 1] \cup \{n\} = \{n\}$.

Pelo **CL**, removemos a ambiguidade dos sinais desses coeficientes requerendo que $\lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{\Psi^-(x_1, x_2)}{A_1 a_1} = \Psi_{\text{th}}(x_1, x_2)$ seja a função de onda para o bilhar triângulo hemiequilátero (th) [134], em que

$$\Psi_{\text{th}}(x_1, x_2) = -4 \left(\sin(\alpha^{(1)} x_1) \sin(\beta^{(1)} x_2) + \sin(\alpha^{(2)} x_1) \sin(\beta^{(2)} x_2) - \sin(\alpha^{(3)} x_1) \sin(\beta^{(3)} x_2) \right), \quad (4.76)$$

com $\alpha^{(1)} = \frac{r\pi}{L}$, $\beta^{(1)} = \frac{r-2s}{\sqrt{3}L}\pi$, $\alpha^{(2)} = \frac{s\pi}{L}$, $\beta^{(2)} = \frac{2r-s}{\sqrt{3}L}\pi$, $\alpha^{(3)} = \frac{r-s}{L}\pi$, $\beta^{(3)} = \frac{r+s}{\sqrt{3}L}\pi$; os inteiros r e s são tais que $r \neq 2s$, $s \neq 2r$, $r \neq \pm s$.

Assim sendo, temos

$$\lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{A_3 \bar{a}_3}{A_1 a_1} = \lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{B_3 a_3}{A_1 a_1} = -1, \quad (4.77)$$

$$\lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{B_1 \bar{a}_1}{A_1 a_1} = 1, \quad (4.78)$$

$$\lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{A_2 a_2}{A_1 a_1} = \lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{B_2 \bar{a}_2}{A_1 a_1} = 1, \quad (4.79)$$

$$\lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{B_1}{A_1} = \lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{\bar{a}_1}{a_1} = -1. \quad (4.80)$$

$$\lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{B_3 \bar{a}_3}{A_1 a_1} = \lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{A_3 a_3}{A_1 a_1} = 1. \quad (4.81)$$

$$\lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{A_2 \bar{a}_2}{A_1 a_1} = \lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{B_2 a_2}{A_1 a_1} = -1. \quad (4.82)$$

Fixando $A_1 = a_2 a_3$, os limites dados pelas Eqs. (4.77)-(4.82) conduzem a $A_2 = -a_3 \bar{a}_1$, $A_3 = \bar{a}_2 \bar{a}_1$, $B_1 = -\bar{a}_2 \bar{a}_3$, $B_2 = a_1 \bar{a}_3$, $B_3 = -a_1 a_2$. Logo, a função de onda explícita é

$$\begin{aligned} \Psi(x_1, x_2) = & \left\{ \begin{array}{c} (a_2 a_3) a_1 \\ (a_2 a_3) \bar{a}_1 \end{array} \right\} e^{i(\alpha^{(1)} x_1 + \beta^{(1)} x_2)} + \left\{ \begin{array}{c} (\bar{a}_2 \bar{a}_1) \bar{a}_3 \\ (\bar{a}_2 \bar{a}_1) a_3 \end{array} \right\} e^{i(\alpha^{(1)} x_1 - \beta^{(1)} x_2)} + \\ & + \left\{ \begin{array}{c} (-\bar{a}_2 \bar{a}_3) \bar{a}_1 \\ (-\bar{a}_2 \bar{a}_3) a_1 \end{array} \right\} e^{i(-\alpha^{(1)} x_1 - \beta^{(1)} x_2)} + \left\{ \begin{array}{c} (-a_1 a_2) a_3 \\ (-a_1 a_2) \bar{a}_3 \end{array} \right\} e^{i(-\alpha^{(1)} x_1 + \beta^{(1)} x_2)} + \\ & + \left\{ \begin{array}{c} (-a_3 \bar{a}_1) a_2 \\ (-a_3 \bar{a}_1) \bar{a}_2 \end{array} \right\} e^{i(\alpha^{(2)} x_1 + \beta^{(2)} x_2)} + \left\{ \begin{array}{c} (a_2 a_3) \bar{a}_1 \\ (a_2 a_3) a_1 \end{array} \right\} e^{i(-\alpha^{(2)} x_1 + \beta^{(2)} x_2)} + \\ & + \left\{ \begin{array}{c} (a_1 \bar{a}_3) \bar{a}_2 \\ (a_1 \bar{a}_3) a_2 \end{array} \right\} e^{i(-\alpha^{(2)} x_1 - \beta^{(2)} x_2)} + \left\{ \begin{array}{c} (-\bar{a}_2 \bar{a}_3) a_1 \\ (-\bar{a}_2 \bar{a}_3) \bar{a}_1 \end{array} \right\} e^{i(\alpha^{(2)} x_1 - \beta^{(2)} x_2)} + \\ & + \left\{ \begin{array}{c} (\bar{a}_2 \bar{a}_1) a_3 \\ (\bar{a}_2 \bar{a}_1) \bar{a}_3 \end{array} \right\} e^{i(-\alpha^{(3)} x_1 + \beta^{(3)} x_2)} + \left\{ \begin{array}{c} (-a_3 \bar{a}_1) \bar{a}_2 \\ (-a_3 \bar{a}_1) a_2 \end{array} \right\} e^{i(\alpha^{(3)} x_1 + \beta^{(3)} x_2)} + \end{aligned}$$

$$+ \left\{ \begin{array}{c} (a_1 \bar{a}_3) a_2 \\ (a_1 \bar{a}_3) \bar{a}_2 \end{array} \right\} e^{i(-\alpha^{(3)} x_1 - \beta^{(3)} x_2)} + \left\{ \begin{array}{c} (-a_1 a_2) \bar{a}_3 \\ (-a_1 a_2) a_3 \end{array} \right\} e^{i(\alpha^{(3)} x_1 - \beta^{(3)} x_2)}. \quad (4.83)$$

A função de onda $\Psi^-(x_1, x_2)$ satisfaz a condição $\Psi^-(0, x_2) = 0$, pois os coeficientes das ondas planas correspondentes aos estados $(-\epsilon_1 \alpha^{(l)}, \epsilon_2 \beta^{(l)})$ e $(\epsilon_1 \alpha^{(l)}, \epsilon_2 \beta^{(l)})$ são simétricos, ou seja, eles têm o mesmo módulo, mas sinais diferentes.

Já a função de onda $\Psi^+(x_1, x_2)$ não satisfaz a condição de contorno $\Psi^+(x_1, 0) = 0$, pois as ondas planas correspondentes aos estados $(\epsilon_1 \alpha^{(l)}, \epsilon_2 \beta^{(l)})$ e $(\epsilon_1 \alpha^{(l)}, -\epsilon_2 \beta^{(l)})$ não se anulam quando $x_2 = 0$, pois resultam na soma de coeficientes complexos $a_l + \bar{a}_l$ que nunca é nula; logo, a função de onda $\Psi(x_1, x_2)$ acima não descreve o nosso sistema.

Embora a Eq. (4.83) não satisfaça a condição $\Psi^+(x_1, 0) = 0$, ela é contínua em $x_2 = \sqrt{3}x_1$, conforme pode-se ver da função de onda obtida da Eq. (4.35),

$$\begin{aligned} \Psi(x_1, x_2) = & \left\{ \begin{array}{c} (a_2 a_3) a_1 e^{i(\alpha^{(1)} x_1 + \beta^{(1)} x_2)} \\ (a_2 a_3) a_1 e^{i(-\alpha^{(2)} x_1 + \beta^{(2)} x_2)} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{c} (a_2 a_3) \bar{a}_1 e^{i(-\alpha^{(2)} x_1 + \beta^{(2)} x_2)} \\ (a_2 a_3) \bar{a}_1 e^{i(\alpha^{(1)} x_1 + \beta^{(1)} x_2)} \end{array} \right\} + \\ & + \left\{ \begin{array}{c} (-\bar{a}_2 \bar{a}_3) a_1 e^{i(\alpha^{(2)} x_1 - \beta^{(2)} x_2)} \\ (-\bar{a}_2 \bar{a}_3) a_1 e^{i(-\alpha^{(1)} x_1 - \beta^{(1)} x_2)} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{c} (-\bar{a}_2 \bar{a}_3) \bar{a}_1 e^{i(-\alpha^{(1)} x_1 - \beta^{(1)} x_2)} \\ (-\bar{a}_2 \bar{a}_3) \bar{a}_1 e^{i(\alpha^{(2)} x_1 - \beta^{(2)} x_2)} \end{array} \right\} + \\ & + \left\{ \begin{array}{c} (-a_3 \bar{a}_1) a_2 e^{i(\alpha^{(2)} x_1 + \beta^{(2)} x_2)} \\ (-a_3 \bar{a}_1) a_2 e^{i(\alpha^{(3)} x_1 + \beta^{(3)} x_2)} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{c} (-a_3 \bar{a}_1) \bar{a}_2 e^{i(\alpha^{(3)} x_1 + \beta^{(3)} x_2)} \\ (-a_3 \bar{a}_1) \bar{a}_2 e^{i(\alpha^{(2)} x_1 + \beta^{(2)} x_2)} \end{array} \right\} + \\ & + \left\{ \begin{array}{c} (a_1 \bar{a}_3) a_2 e^{i(-\alpha^{(3)} x_1 - \beta^{(3)} x_2)} \\ (a_1 \bar{a}_3) a_2 e^{i(-\alpha^{(2)} x_1 - \beta^{(2)} x_2)} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{c} (a_1 \bar{a}_3) \bar{a}_2 e^{i(-\alpha^{(2)} x_1 - \beta^{(2)} x_2)} \\ (a_1 \bar{a}_3) \bar{a}_2 e^{i(-\alpha^{(3)} x_1 - \beta^{(3)} x_2)} \end{array} \right\} + \\ & + \left\{ \begin{array}{c} (\bar{a}_2 \bar{a}_1) a_3 e^{i(-\alpha^{(3)} x_1 + \beta^{(3)} x_2)} \\ (\bar{a}_2 \bar{a}_1) a_3 e^{i(\alpha^{(1)} x_1 - \beta^{(1)} x_2)} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{c} (\bar{a}_2 \bar{a}_1) \bar{a}_3 e^{i(\alpha^{(1)} x_1 - \beta^{(1)} x_2)} \\ (\bar{a}_2 \bar{a}_1) \bar{a}_3 e^{i(-\alpha^{(3)} x_1 + \beta^{(3)} x_2)} \end{array} \right\} + \\ & + \left\{ \begin{array}{c} (-a_1 a_2) a_3 e^{i(-\alpha^{(1)} x_1 + \beta^{(1)} x_2)} \\ (-a_1 a_2) a_3 e^{i(\alpha^{(3)} x_1 - \beta^{(3)} x_2)} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{c} (-a_1 a_2) \bar{a}_3 e^{i(\alpha^{(3)} x_1 - \beta^{(3)} x_2)} \\ (-a_1 a_2) \bar{a}_3 e^{i(-\alpha^{(1)} x_1 + \beta^{(1)} x_2)} \end{array} \right\}. \quad (4.84) \end{aligned}$$

Essa verificação é importante porque os coeficientes “A” foram redefinidos pelo **CL**.

Consideremos, agora, as condições de contorno $\Psi^-(x_1, \sqrt{3}L) = 0$ e $\Psi^+(1L, x_2) = 0$. A função de onda $\Psi^-(x_1, x_2)$ não satisfaz $\Psi^-(x_1, \sqrt{3}L) = 0$ para valores finitos de $\tilde{\lambda}$: considerando pares de estados $(\epsilon_1 \alpha^{(l)}, \epsilon_2 \beta^{(l)})$ e $(\epsilon_1 \alpha^{(l)}, -\epsilon_2 \beta^{(l)})$, quando $x_2 = \sqrt{3}L$, obtemos as seguintes equações de Bethe

$$e^{i2\beta^{(1)}\sqrt{3}L} = -\frac{\bar{a}_1 \bar{a}_2 \bar{a}_3}{a_1 a_2 a_3}, \quad e^{i2\beta^{(2)}\sqrt{3}L} = -\frac{a_1 \bar{a}_2 \bar{a}_3}{\bar{a}_1 a_2 a_3}, \quad e^{i2\beta^{(3)}\sqrt{3}L} = -\frac{a_1 a_2 \bar{a}_3}{\bar{a}_1 \bar{a}_2 a_3}. \quad (4.85)$$

Pelas definições de $\alpha^{(l)}$ e $\beta^{(l)}$ das Eqs. (4.73)-(4.75) em função de α e β , notamos, por exemplo, que

$$\beta^{(1)} = \beta^{(2)} - \beta^{(3)},$$

o que significa que

$$e^{i2\beta^{(1)}\sqrt{3}L} = e^{i2(\beta^{(2)}-\beta^{(3)})\sqrt{3}L} = e^{i2\beta^{(2)}\sqrt{3}L} e^{-i2\beta^{(3)}\sqrt{3}L}. \quad (4.86)$$

Substituindo as Eqs. (4.85) na Eq. (4.86), obtemos

$$\frac{\bar{a}_1 a_2 \bar{a}_3}{a_1 \bar{a}_2 a_3} = -1, \quad (4.87)$$

que é verdadeiro apenas para $\tilde{\lambda} \rightarrow \infty$. Isso significa que a condição de quantização estabelecida pelas equações de Bethe,

$$\beta^{(l)}\sqrt{3}L = \frac{q^{(l)}\pi}{2} + \arctg\left(\frac{\tilde{\lambda}}{\beta^{(l)}}\right) - \arctg\left(\frac{\tilde{\lambda}}{\frac{\sqrt{3}\alpha^{(l)}-\beta^{(l)}}{2}}\right) + \arctg\left(\frac{\tilde{\lambda}}{\frac{\sqrt{3}\alpha^{(l)}+\beta^{(l)}}{2}}\right), \quad (4.88)$$

com $q^{(l)}$ um inteiro, não é consistente. Além disso, ao contrário da condição de quantização para $\gamma = 1$, na qual as duas equações transcendentais estão acopladas, as Eqs. (4.88), com $l \in \{1, 2, 3\}$, tem $\alpha^{(1)}$ como um termo livre. A condição de quantização de $\alpha^{(l)}$ é determinada apenas pela condição de contorno $\Psi^+(1L, x_2) = 0$, conduzindo às equações de Bethe,

$$e^{i2\alpha^{(1)}L} = \frac{a_1 \bar{a}_3}{\bar{a}_1 a_3}, \quad e^{i2\alpha^{(2)}L} = \frac{a_1 a_2}{\bar{a}_1 \bar{a}_2}, \quad e^{i2\alpha^{(3)}L} = \frac{\bar{a}_2 \bar{a}_3}{a_2 a_3}. \quad (4.89)$$

Aplicando as definições de $\alpha^{(l)}$ e $\beta^{(l)}$ dada pelas Eqs. (4.73)-(4.75), constata-se, por exemplo, que

$$\alpha^{(1)} = \alpha^{(2)} + \alpha^{(3)} \quad \text{implica} \quad \text{que} \quad e^{i2\alpha^{(1)}L} = e^{i2\alpha^{(2)}L} e^{i2\alpha^{(3)}L}.$$

De fato, a substituição das equações de Bethe dá o resultado desejado,

$$e^{i2\alpha^{(1)}L} = \frac{a_1 a_2}{\bar{a}_1 \bar{a}_2} \frac{\bar{a}_2 \bar{a}_3}{a_2 a_3} = \frac{a_1 \bar{a}_3}{\bar{a}_1 a_3}.$$

Conclusão análoga se tem para $\alpha^{(2)} = \alpha^{(1)} - \alpha^{(3)}$ e $\alpha^{(3)} = \alpha^{(1)} - \alpha^{(2)}$. Isso significa que existe uma condição de quantização consistente para $\alpha^{(l)}$, formalmente semelhante àquela para $\gamma = 1$; contudo, como nem sequer $\Psi^+(x_1, 0) = 0$, não há sentido explicitá-la aqui.

Assim como feito para $\gamma = 1$, realizamos também a “prova real” para $\gamma = 3$: aplicando o limite $\tilde{\lambda} \rightarrow \infty$ nas Eqs. (4.85), as equações de Bethe reduzem-se a $e^{i2\beta^{(l)}\sqrt{3}L} = 1$, para

todo $l \in \{1, 2, 3\}$; usando as definições das Eqs. (4.73)-(4.75), obtemos os mesmos $\alpha^{(l)}$ e $\beta^{(l)}$ da Eq. (4.76). Substituindo-os na função de onda dada por $\lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{\Psi^-(x_1, x_2)}{A_1 a_1} := \Psi^-(x_1, x_2)$ finito, obtemos

$$\Psi^-(x_1, x_2) = -4 \left[\sin\left(\frac{r\pi}{L}x_1\right) \sin\left(\frac{(r-2s)\pi}{\sqrt{3}L}x_2\right) + \sin\left(\frac{s\pi}{L}x_1\right) \sin\left(\frac{(2r-s)\pi}{\sqrt{3}L}x_2\right) - \sin\left(\frac{(r-s)\pi}{L}x_1\right) \sin\left(\frac{(r+s)\pi}{\sqrt{3}L}x_2\right) \right]. \quad (4.90)$$

Aplicando a Eq. (4.90) na equação de Schrödinger, Eq. (4.68), determinamos os autovalores de energia do bilhar triângulo hemiequilátero,

$$\mathcal{E}_{rs} = \frac{4\pi^2}{3L^2}(r^2 - rs + s^2). \quad (4.91)$$

Ambas as Eqs. (4.90) e (4.91) são equivalentes à função de onda e os autovalores de energia calculados por H. C. Schachner e G. M. Obermair em [134]. A Eq. (4.91) mostra que as três parcelas contendo os números quânticos são quantidades inteiras, ou seja, os níveis de energia são comensuráveis entre si, apesar dos catetos, $\sqrt{3}L$ e $1L$, do bilhar triângulo hemiequilátero serem incomensuráveis; assim, também não existe uma constante irracional \mathfrak{c} semelhante a da Eq. (2.6); portanto, a distribuição dos níveis de energia vizinhos não será Poisson, como o primeiro gráfico da primeira linha da Fig. 5.8 demonstra.

A inconsistência da função de onda para $\tilde{\lambda}$ finito também permanece para $\tilde{\lambda} = 0$, pois a Eq. (4.83) se reduz a

$$\Psi(x_1, x_2) = 4[\sin(\alpha^{(1)}x_1) \cos(\beta^{(1)}x_2) - \sin(\beta^{(2)}x_1) \cos(\alpha^{(2)}x_2) - \sin(\alpha^{(3)}x_1) \cos(\beta^{(3)}x_2)],$$

diferente do esperado de uma generalização ingênua da função de onda para $\gamma = 1$, Eq. (4.70), que seria uma superposição de três produtos de funções senos,

$$\Psi(x_1, x_2) = 4[\sin(\alpha^{(1)}x_1) \sin(\alpha^{(1)}x_2) + \sin(\alpha^{(2)}x_1) \sin(\beta^{(2)}x_2) + \sin(\alpha^{(3)}x_1) \sin(\beta^{(3)}x_2)].$$

Além disso, as equações de Bethe dadas pelas Eqs. (4.85) e (4.89) tornam-se $e^{i2\beta^{(l)}\sqrt{3}L} = -1$ e $e^{i2\alpha^{(l)}L} = 1$, respectivamente. No entanto, o resultado $e^{i2\beta^{(l)}\sqrt{3}L} = -1$, para todo $l \in \{1, 2, 3\}$ contraria a Eq. (4.86), pois temos a contradição $-1 = 1$. Isso significa que a condição de quantização dada pela Eq. (4.88) nem mesmo vale para $\tilde{\lambda} = 0$.

Portanto, a construção acima de uma solução do tipo *Ansatz* de Bethe é consistente com as condições de contorno apenas para a $\Psi^-(x_1, x_2)$ no limite infinito de intensidade do potencial de interação.

Há outras abordagens analíticas possíveis para resolver o problema original que também falharam; ainda assim, elas foram importantes para um entendimento profundo das limitações da aplicabilidade de funções de onda do tipo *Ansatz* de Bethe. Essas abordagens são tratadas na subseção 4.2.5.

4.2.4 Breve Descrição do Cálculo Numérico do Caso $\gamma = 3$ e Algumas Soluções Específicas

Como não é possível uma solução analítica do tipo *Ansatz* de Bethe, com a colaboração do Prof. Dr. Fábio M. Zanetti, geramos a função de onda numericamente para $\gamma = 3$ (e também para $\gamma = \frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}-1}$, mostrada no fim da subseção 4.2.6) em função da intensidade $\hat{\lambda}$ do potencial pelo Método de Contorno de Parede (MCP), ou *Boundary Wall Method*. Esse método foi desenvolvido por M. G. E. da Luz, A. S. Lupu-Sax e E. J. Heller [179] para resolver o problema de espalhamento quântico por contornos arbitrários, abertos ou fechados, e aprimorado posteriormente para a obtenção da função de onda em bilhares por F. M. Zanetti, E. Vicentini e M. G. E. da Luz [180]. Especificamente falando, o problema que o MCP resolve é o de espalhamento de uma função de onda de partícula livre $\phi_{\text{livre}}(\mathbf{r})$ por um obstáculo C_{ob} , com uma forma geométrica qualquer. Para se obter a função de onda espalhada, usamos a equação integral de espalhamento [177], que é uma solução da equação de Schrödinger, juntamente com o potencial $V(\mathbf{r}) = \int_{C_{\text{ob}}} \lambda \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}(s)) ds$, em que λ é a intensidade do potencial sobre o obstáculo e $\mathbf{r}(s)$ é o vetor posição em um ponto s de C_{ob} . Esse potencial garante que a interação da função de onda da partícula seja apenas nos pontos pertencentes ao obstáculo e compatível com a condição de contorno de Dirichlet³. Além disso, sendo $T_{\lambda}^{-1}(s_b, s_a) \equiv \delta(s_b - s_a) - \lambda G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}(s_b))$, em que $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}(s_b))$ é a função de Green da partícula livre, e considerando o limite $T(s_b, s_a) = -\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \lambda T_{\lambda}(s_b, s_a)$ para se garantir a condição de contorno de Dirichlet, a função de onda espalhada pelo obstáculo em qualquer ponto do espaço é [181]

$$\psi_{\text{espalhada}}(\mathbf{r}) = \phi_{\text{livre}}(\mathbf{r}) - \phi^{\text{T}}(\mathbf{r}), \quad \phi^{\text{T}}(\mathbf{r}) = \int_{C_{\text{ob}}} \int_{C_{\text{ob}}} G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}(s_b)) T(s_b, s_a) \phi(\mathbf{r}(s_a)) ds_b ds_a, \quad (4.92)$$

ou seja, essa função de onda fornece os estados de espalhamento (região externa ao obstáculo impenetrável) e os autoestados do obstáculo (região interna). A função $\phi^{\text{T}}(\mathbf{r})$ pode ser interpretada como sendo o resultado de “fontes pontuais” ao longo do obstáculo C_{ob} , agindo como uma “frente de onda”. Assim, cada posição s_b propaga-se livremente até

³Condição de Contorno de Dirichlet estabelece que a função de onda deve ser nula na superfície do obstáculo.

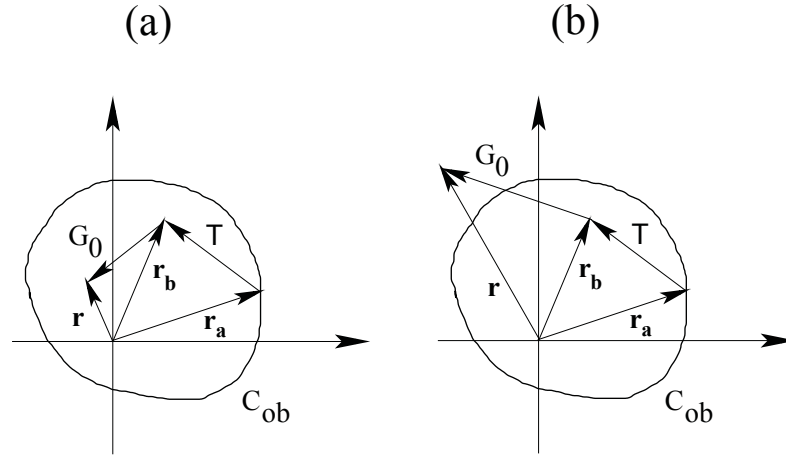


Figura 4.3: Interpretação do processo de espalhamento na região (a) interna e (b) externa de um bilhar. A função $\phi^T(\mathbf{r})$ é o resultado da soma de todas as contribuições s_a para gerar uma “fonte pontual” em s_b via ação da função de Green $G_0 := G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}(s_b))$ e, por sua vez, a soma de cada “fonte pontual” s_b , propagada por $T := T(s_b, s_a)$, determina uma contribuição pontual em \mathbf{r} para compor a função de onda espalhada.

a posição \mathbf{r} por meio da função de Green $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}(s_b))$. Mas, cada posição s_b é originária de uma onda incidente $\phi_{\text{livre}}(\mathbf{r})$ espalhada por todo o obstáculo; então, para uma posição s_a , $T(s_b, s_a)$ propaga $\phi(\mathbf{r}(s_a))$ à posição s_b , de maneira que as somas das posições s_a contribuem para cada s_b , funcionando como uma fonte pontual. Se o obstáculo for um contorno fechado, temos um bilhar, cuja função de onda existirá, contanto que o formato e a energia da função de onda incidente $\phi_{\text{livre}}(\mathbf{r})$ seja compatível com o bilhar; do contrário, a função de onda será nula na região interna. A Fig. 4.3 ilustra essa interpretação para as regiões interna e externa do bilhar. Assim, para determinar a função de onda espalhada, basta calcular $T(s_b, s_a)$ sobre o contorno C_{ob} do bilhar. A discretização do contorno C_{ob} e da Eq. (4.92) permite a implementação numérica para o cálculo da função de onda de qualquer bilhar. Essa é uma descrição simplificada e qualitativa do MCP usado para gerar os gráficos de densidades de probabilidade das Figs. 4.4 e 4.10. Para detalhes, consulte [180, 181].

A Fig. 4.4 mostra as densidades de probabilidades obtidas numericamente por MCP. Como o bilhar é um retângulo, a função de onda incidente deve ter uma energia E condisente com as autoenergias de um bilhar retangular e, para isso, deve ser também, uma superposição de funções $\sin(k_{x_1}^{(i)} x_1) \sin(k_{x_2}^{(i)} x_2)$ pois, do contrário, não teríamos uma solução no interior do bilhar. Por isso, na Fig. 4.4(a), temos para $\hat{\lambda} = 0,01$ uma função de onda com a morfologia predominantemente de um bilhar retangular. Isso condiz com a interpretação do problema como um sistema 1D de duas partículas confinadas distinguíveis. À medida que se aumenta $\hat{\lambda}$, diminui-se a permeabilidade da parede, granulando-se o perfil da função de onda, Fig. 4.4(b), até que a função de onda adquira uma morfologia

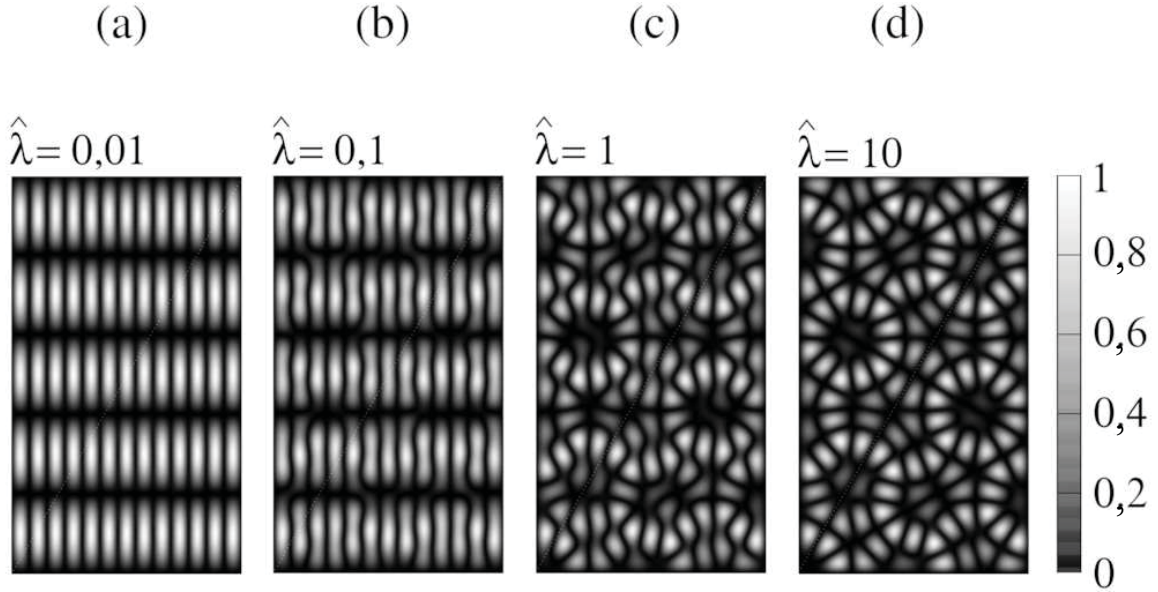


Figura 4.4: Gráficos das densidades de probabilidade $|\Psi(x_1, x_2)|^2$ normalizadas, via MCP, para um bilhar retangular com uma parede permeável em $x_2 = \sqrt{3}x_1$. Para o par de números quânticos $(r, s) = (13, 5)$, ilustramos $|\Psi(x_1, x_2)|^2$ em função dos valores de $\hat{\lambda}$, em que $\hat{\lambda} = 2\tilde{\lambda}$: predomina-se o perfil de autoestados de um bilhar retangular para valores relativamente pequenos de $\hat{\lambda}$, (a) e (b); à medida que se aumenta $\hat{\lambda}$, a morfologia muda para autoestados de dois bilhares hemiequiláteros. Esta figura é uma contribuição do Prof. Dr. Fábio M. Zanetti.

predominantemente de dois triângulos hemiequiláteros, Figs. 4.4(c) e (d). Para $\hat{\lambda} = 10$, já é possível observar a diagonal separando as duas partes triangulares, significando que a amplitude da função de onda lá é relativamente muito pequena, mas ainda não nula.

4.2.5 Abordagens Analíticas Alternativas na Tentativa de Obtenção da Função de Onda para $\gamma = 3$

Apresentamos aqui três abordagens alternativas para se obter a função de onda para $\gamma = 3$:

- O completamento de coeficientes das ondas planas: embora a função de onda preserve a continuidade sobre a diagonal do bilhar retangular e a condição de contorno do potencial delta de Dirac, a função de onda pode não se anular nas paredes. Então, na tentativa de recuperar esta propriedade, redefinimos recursivamente os coeficientes “ A ” em termos dos “ a ”;
- A construção da função de onda via simetria de reflexão invertida: o bilhar retangular é formado por dois triângulos hemiequiláteros, sendo que um deles deve ser refletido especularmente em relação à hipotenusa, seguida de uma segunda reflexão em relação a

um eixo perpendicular à hipotenusa que passa pelo seu ponto médio; assim, aplicamos essa transformação nas coordenadas da função de onda já válida em um dos domínios;

► A construção da função de onda via simetria especular: a reflexão especular de um triângulo retângulo em relação à hipotenusa gera um quadrilátero em forma de pipa (*kite*). Aplicamos, então, essa transformação na função de onda previamente conhecida, para se ter a função de onda no domínio refletido.

Estas abordagens serão aplicadas para se obter a função de onda $\Psi^+(x_1, x_2)$, pois a $\Psi^-(x_1, x_2)$ já se anula nas paredes, mesmo sabendo que não é possível estabelecer uma condição de quantização para valores finitos de intensidade do potencial de interação.

1) O completamento de coeficientes das ondas planas

Considere a função de onda $\Psi^+(x_1, x_2)$ expandida em pares de ondas planas antes-depois de uma colisão p-p, como na Eq. (4.84),

$$\begin{aligned}
 \Psi^+(x_1, x_2) = & (\dots \bar{a}_3 \bar{a}_2)(a_2 a_3) a_1 e^{i(-\alpha^{(2)} x_1 + \beta^{(2)} x_2)} + (\dots \bar{a}_2)(a_2 a_3) \bar{a}_1 e^{i(\alpha^{(1)} x_1 + \beta^{(1)} x_2)} + \\
 & + (\dots)(-\bar{a}_2 \bar{a}_3) a_1 e^{i(-\alpha^{(1)} x_1 - \beta^{(1)} x_2)} + (\dots)(-\bar{a}_2 \bar{a}_3) \bar{a}_1 e^{i(\alpha^{(2)} x_1 - \beta^{(2)} x_2)} + \\
 & + (\dots)(-a_3 \bar{a}_1) a_2 e^{i(\alpha^{(3)} x_1 + \beta^{(3)} x_2)} + (\dots)(-a_3 \bar{a}_1) \bar{a}_2 e^{i(\alpha^{(2)} x_1 + \beta^{(2)} x_2)} + \\
 & + (\dots \bar{a}_3 \bar{a}_2)(a_1 \bar{a}_3) a_2 e^{i(-\alpha^{(2)} x_1 - \beta^{(2)} x_2)} + (\dots \bar{a}_1 a_3 \bar{a}_2)(a_1 \bar{a}_3) \bar{a}_2 e^{i(-\alpha^{(3)} x_1 - \beta^{(3)} x_2)} + \\
 & + (\dots a_1 a_3 \bar{a}_2 \bar{a}_2)(\bar{a}_2 \bar{a}_1) a_3 e^{i(\alpha^{(1)} x_1 - \beta^{(1)} x_2)} + (\dots \bar{a}_2 a_1 a_3 \bar{a}_2)(\bar{a}_2 \bar{a}_1) \bar{a}_3 e^{i(-\alpha^{(3)} x_1 + \beta^{(3)} x_2)} + \\
 & + (\dots)(-a_1 a_2) a_3 e^{i(\alpha^{(3)} x_1 - \beta^{(3)} x_2)} + (\dots)(-a_1 a_2) \bar{a}_3 e^{i(-\alpha^{(1)} x_1 + \beta^{(1)} x_2)}. \quad (4.93)
 \end{aligned}$$

Os espaços vazios entre os parênteses correspondem às ondas planas que não foram necessárias para a análise aqui, de maneira que a conjugação complexa é suficiente para preenchê-las ocasionalmente.

No presente caso, a função de onda já apresenta uma expansão finita utilizando-se combinações de 6 coeficientes “ a ” disponíveis, mas ainda insuficientes para se ter $\Psi^+(x_1, 0) = 0$. Devemos lembrar que essas combinações foram obtidas através de duas condições:

Condição I (CI): o anulamento de duas ondas planas apropriadas de mesmo índice l , conforme Eq. (4.43);

Condição II (CII): a preservação da solução base dada pela Eq. (4.27).

O objetivo aqui é aplicar recursivamente as duas condições acima na Eq. (4.93), a fim de conciliá-las, como ocorreu para $\gamma = 1$ e, parcialmente, para $\Psi^-(x_1, x_2)$, por causa da

inconsistência da condição de quantização.

Para a nossa análise, estabelecemos três convenções:

- 1) Quando nos referirmos ao anulamento das funções de onda, fica subentendido que ela ocorre em $x_2 = 0$, como explicado na seção 4.2.1.
- 2) As menções “destaque em (cor)” remete sempre à Eq. (4.93).
- 3) Após a Eq. (4.94), omitimos os sinais dos coeficientes gerados por **CI** na análise por uma questão de simplicidade de notação, não sendo relevantes, por ora, para o nosso objetivo aqui. Subentende-se, então, que eles têm sinais diferentes.

Escolhamos o par de ondas planas $e^{i(\alpha^{(1)}x_1 - \beta^{(1)}x_2)}$ e $e^{i(\alpha^{(1)}x_1 + \beta^{(1)}x_2)}$ da Eq. (4.93); a imposição do anulamento delas resulta em $a_2 + \bar{a}_2 = 0$, que é falso. Para que elas realmente se anulem, recorreremos à **CI**, de modo que

$$\mathcal{A}(a_2 a_3 \bar{a}_1) + \mathcal{B}(\bar{a}_2 \bar{a}_1 a_3) = 0 \Rightarrow \mathcal{A} = \pm \bar{a}_2, \quad \mathcal{B} = \mp a_2, \quad (4.94)$$

ou seja, devemos incluir \bar{a}_2 nos coeficientes de $e^{i(\alpha^{(1)}x_1 + \beta^{(1)}x_2)}$ e a_2 nos coeficientes de $e^{i(\alpha^{(1)}x_1 - \beta^{(1)}x_2)}$ (destaque em vermelho).

As ondas planas $e^{i(\alpha^{(1)}x_1 + \beta^{(1)}x_2)}$ e $e^{i(-\alpha^{(2)}x_1 + \beta^{(2)}x_2)}$ são um par antes-depois de uma colisão p-p e, pela condição **CII**, incluímos \bar{a}_2 (destaque em vermelho) em seus coeficientes; por sua vez, esta onda plana deve se anular com a $e^{i(-\alpha^{(2)}x_1 - \beta^{(2)}x_2)}$; para isso, é insuficiente a inclusão do fator \bar{a}_2 em seus coeficientes, pois o anulamento delas resulta em $a_3 + \bar{a}_3 = 0$. Por **CI**, precisamos inserir \bar{a}_3 (destaque em azul) nos coeficientes de $e^{i(-\alpha^{(2)}x_1 + \beta^{(2)}x_2)}$ e a_3 (destaque em azul) aos coeficientes de $e^{i(-\alpha^{(2)}x_1 - \beta^{(2)}x_2)}$. Como seu par antes-depois de uma colisão p-p é a onda plana $e^{i(-\alpha^{(3)}x_1 - \beta^{(3)}x_2)}$, incluímos nela $a_3 \bar{a}_2$ por **CII**.

Agora, para que $e^{i(-\alpha^{(3)}x_1 - \beta^{(3)}x_2)}$ se anule com a $e^{i(-\alpha^{(3)}x_1 + \beta^{(3)}x_2)}$, por **CI**, inserimos \bar{a}_1 (destaque em verde) nos coeficientes de $e^{i(-\alpha^{(3)}x_1 - \beta^{(3)}x_2)}$ e $a_1 a_3 \bar{a}_2$ (destaque em verde) nos coeficientes de $e^{i(-\alpha^{(3)}x_1 + \beta^{(3)}x_2)}$; sendo $e^{i(\alpha^{(1)}x_1 - \beta^{(1)}x_2)}$ o seu par antes-depois de uma colisão p-p, por **CII**, completamos os coeficientes com a_2 (destaque em vermelho) e $a_1 a_3 \bar{a}_2$ (destaque em azul), respectivamente.

Desse modo, a análise acima é a descrição do seguinte ciclo,

$$\begin{aligned} e^{i(\alpha^{(1)}x_1 - \beta^{(1)}x_2)} &\rightarrow e^{i(\alpha^{(1)}x_1 + \beta^{(1)}x_2)} \rightarrow e^{i(-\alpha^{(2)}x_1 + \beta^{(2)}x_2)} \rightarrow e^{i(-\alpha^{(2)}x_1 - \beta^{(2)}x_2)} \rightarrow \\ &\quad e^{i(-\alpha^{(3)}x_1 - \beta^{(3)}x_2)} \rightarrow e^{i(-\alpha^{(3)}x_1 + \beta^{(3)}x_2)} \rightarrow e^{i(\alpha^{(1)}x_1 - \beta^{(1)}x_2)}, \end{aligned} \quad (4.95)$$

gerado pela alternância de **CI** e **CII**.

O ciclo (4.95) iniciou com a onda plana $e^{i(\alpha^{(1)}x_1 - \beta^{(1)}x_2)}$ com amplitude $(\bar{a}_2\bar{a}_1)a_3$ e terminou com amplitude $(a_1a_3\bar{a}_2a_2)(\bar{a}_2\bar{a}_1)a_3 = |a_1|^2|a_2|^2\bar{a}_2a_3^2$; além disso, para iniciar o segundo ciclo, deve ocorrer a inclusão de \bar{a}_3 , em decorrência de **CI** e **CII**, indicando que essas duas condições nunca serão conciliadas e, conseqüentemente, o ciclo (4.95) é infinito. Observando as amplitudes da onda plana $e^{i(\alpha^{(1)}x_1 - \beta^{(1)}x_2)}$, por exemplo, percebe-se um efeito acumulativo de potências de a_l e \bar{a}_l , levando à geração de expressões polinomiais $(1 + i\mathbb{X})^g$, cujo grau g é proporcional ao número de recursões do processo de completamento. A expansão dessas formas polinomiais levam a uma grande variedade de superposições das 12 ondas planas de $\Psi^+(x_1, x_2)$. Como o grau g pode ser qualquer quantidade finita, temos um comportamento similar ao definido pela Conjectura de Berry [182, 183], que afirma que em sistemas quanticamente caóticos, a função de onda do sistema é bem descrita por uma superposição aleatória de ondas planas. Apesar da superposição recorrente ser para um conjunto finito de ondas planas não aleatórias, acreditamos que esse é um indício da não integrabilidade da função de onda analisada aqui. Devemos lembrar que a função de onda $\Psi^+(x_1, x_2)$ é parte da função de onda $\Psi(x_1, x_2)$ da Eq. (4.84), ou seja, todas as operações realizadas aqui devem ser feitas também para $\Psi^-(x_1, x_2)$, a fim de se preservar a continuidade e as condições de contorno que definem a interação delta de Dirac e o anulamento da função de onda nas paredes do bilhar retangular.

2) Construção da função de onda via simetria de reflexão invertida

O bilhar retangular para $\gamma = 3$ está representado na Fig. 4.5(a). Ela mostra que a região triangular para $\sqrt{\gamma}x_1 \geq x_2$ não é imagem especular da região $\sqrt{\gamma}x_1 \leq x_2$ e, assim, não possui a simetria da solução base discutida na seção 4.1.2. Em vez disso, a simetria presente é de uma reflexão invertida: em relação ao centro do bilhar retangular, os pontos (x_1, x_2) e (x'_1, x'_2) posicionados a 180° entre si são equivalentes, de maneira que a função de onda tenha o mesmo valor nesses pontos (veja a Fig. 4.5(b)), por uma questão de acomodação geométrica no bilhar (o **Apêndice F** apresenta alternativamente esta situação no referencial de centro de massa e relativa). Essa característica é corroborada pelos resultados numéricos obtidos por M. Vessen [184].

Em vista dessa simetria de reflexão invertida, cada onda plana $e^{i(\kappa_1x_1 + \kappa_2x_2)}$ de $\Psi^-(x_1, x_2)$ deve corresponder a uma onda plana $e^{i(\kappa_1(L_1 - x'_1) + \kappa_2(L_2 - x'_2))}$ de $\Psi^+(x'_1, x'_2)$, em que $L_1 = \sqrt{1}L$ e $L_2 = \sqrt{3}L$. Podemos separar os termos relacionados a L_1 e L_2 dos termos x'_1 e x'_2 ,

$$\kappa_1x_1 + \kappa_2x_2 = \kappa_1\sqrt{m_1}L + \kappa_2\sqrt{m_2}L - \kappa_1x'_1 - \kappa_2x'_2.$$

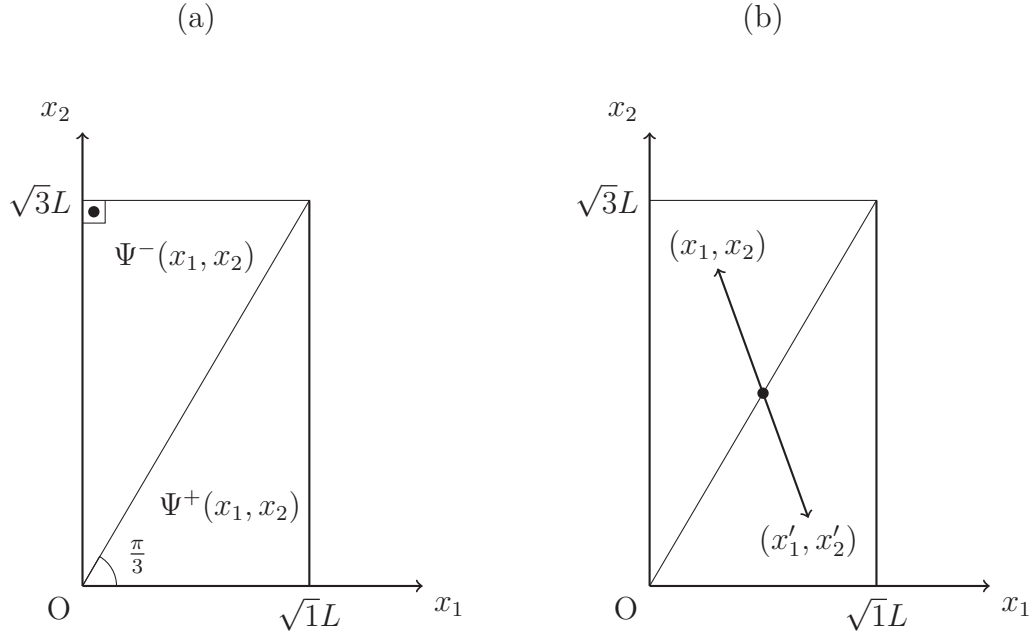


Figura 4.5: (a) Espaço de configuração do bilhar retangular com parede permeável para $\gamma = 3$ ($\theta = \frac{2\pi}{3}$), em que $\Psi^-(x_1, x_2)$ é a função de onda em $x_1 \leq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}}$ e $\Psi^+(x_1, x_2)$ é a função de onda em $x_1 \geq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}}$. (b) Demonstração da simetria de reflexão invertida: cada ponto (x_1, x_2) em $x_1 \leq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}}$ corresponde a um ponto (x'_1, x'_2) em que $x'_1 \leq \frac{x'_2}{\sqrt{\gamma}}$ a 180° entre si. Nesses pontos, $|\Psi^-(x_1, x_2)| = |\Psi^+(x'_1, x'_2)|$.

Como o número de onda do centro de massa é $\mathcal{K} = \frac{\kappa_1\sqrt{m_1} + \kappa_2\sqrt{m_2}}{\sqrt{M}}$, temos

$$\kappa_1 x_1 + \kappa_2 x_2 = \mathcal{K}\sqrt{M}L - \kappa_1 x'_1 - \kappa_2 x'_2.$$

Consequentemente, a relação entre as ondas planas em $x_1 \leq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}}$ e $x_1 \geq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}}$ fica

$$e^{i(\kappa_1 x_1 + \kappa_2 x_2)} = e^{i\mathcal{K}\sqrt{M}L} e^{-i(\kappa_1 x'_1 + \kappa_2 x'_2)}. \quad (4.96)$$

Aplicando essa transformação na função de onda $\Psi^-(x_1, x_2)$ da Eq. (4.83), obtemos a função de onda $\Phi^+(x'_1, x'_2)$,

$$\begin{aligned} \Phi^+(x'_1, x'_2) = & (a_2 a_3) a_1 e^{i(\alpha^{(1)} + \sqrt{3}\beta^{(1)})L} e^{i(-\alpha^{(1)} x'_1 - \beta^{(1)} x'_2)} + (\bar{a}_2 \bar{a}_1) \bar{a}_3 e^{i(\alpha^{(1)} - \sqrt{3}\beta^{(1)})L} e^{i(-\alpha^{(1)} x'_1 + \beta^{(1)} x'_2)} - \\ & - (\bar{a}_2 \bar{a}_3) \bar{a}_1 e^{i(-\alpha^{(1)} - \sqrt{3}\beta^{(1)})L} e^{i(\alpha^{(1)} x'_1 + \beta^{(1)} x'_2)} - (a_1 a_2) a_3 e^{i(-\alpha^{(1)} + \sqrt{3}\beta^{(1)})L} e^{i(\alpha^{(1)} x'_1 - \beta^{(1)} x'_2)} - \\ & - (a_3 \bar{a}_1) a_2 e^{i(\alpha^{(2)} + \sqrt{3}\beta^{(2)})L} e^{i(-\alpha^{(2)} x'_1 - \beta^{(2)} x'_2)} + (a_2 a_3) \bar{a}_1 e^{i(-\alpha^{(2)} + \sqrt{3}\beta^{(2)})L} e^{i(\alpha^{(2)} x'_1 - \beta^{(2)} x'_2)} + \\ & + (a_1 \bar{a}_3) \bar{a}_2 e^{i(-\alpha^{(2)} - \sqrt{3}\beta^{(2)})L} e^{i(\alpha^{(2)} x'_1 + \beta^{(2)} x'_2)} - (\bar{a}_2 \bar{a}_3) a_1 e^{i(\alpha^{(2)} - \sqrt{3}\beta^{(2)})L} e^{i(-\alpha^{(2)} x'_1 + \beta^{(2)} x'_2)} + \\ & + (\bar{a}_2 \bar{a}_1) a_3 e^{i(-\alpha^{(3)} + \sqrt{3}\beta^{(3)})L} e^{i(\alpha^{(3)} x'_1 - \beta^{(3)} x'_2)} - (a_3 \bar{a}_1) \bar{a}_2 e^{i(\alpha^{(3)} + \sqrt{3}\beta^{(3)})L} e^{i(-\alpha^{(3)} x'_1 - \beta^{(3)} x'_2)} + \end{aligned}$$

$$+ (a_1 \bar{a}_3) a_2 e^{i(-\alpha^{(3)} - \sqrt{3}\beta^{(3)})L} e^{i(\alpha^{(3)} x'_1 + \beta^{(3)} x'_2)} - (a_1 a_2) \bar{a}_3 e^{i(\alpha^{(3)} - \sqrt{3}\beta^{(3)})L} e^{i(-\alpha^{(3)} x'_1 + \beta^{(3)} x'_2)}. \quad (4.97)$$

Verifiquemos se $\Phi^+(x'_1, x'_2)$ satisfaz $\Phi^+(x'_1, 0) = 0$ e $\Phi^+(1L, x'_2) = 0$.

• **Condição de contorno** $\Phi^+(x'_1, 0) = 0$: considerando a primeira linha da Eq. (4.97), temos:

$$(a_2 a_3) a_1 e^{i(\alpha^{(1)} + \sqrt{3}\beta^{(1)})L} e^{i(-\alpha^{(1)} x'_1)} + (\bar{a}_2 \bar{a}_1) \bar{a}_3 e^{i(\alpha^{(1)} - \sqrt{3}\beta^{(1)})L} e^{i(-\alpha^{(1)} x'_1)} = 0,$$

da qual obtemos a equação de Bethe

$$e^{i2\beta^{(1)}\sqrt{3}L} = -\frac{\bar{a}_1 \bar{a}_2 \bar{a}_3}{a_1 a_2 a_3},$$

que é um resultado esperado, uma vez que $\Phi^+(x'_1, x'_2)$ foi construída diretamente de $\Psi^-(x_1, x_2)$; aplicando este procedimento para as demais ondas planas, as Eqs. (4.85) são obtidas.

• **Condição de contorno** $\Phi^+(\sqrt{1}L, x'_2) = 0$: considere as duas primeiras ondas planas das duas primeiras linhas da $\Phi^+(x'_1, x'_2)$ acima, na qual se fez $x'_1 = \sqrt{1}L$,

$$(a_2 a_3) a_1 e^{i(\alpha^{(1)} + \sqrt{3}\beta^{(1)})L} e^{i(-\alpha^{(1)} \sqrt{1}L - \beta^{(1)} x'_2)} - (a_1 a_2) a_3 e^{i(-\alpha^{(1)} + \sqrt{3}\beta^{(1)})L} e^{i(\alpha^{(1)} \sqrt{1}L - \beta^{(1)} x'_2)},$$

e como $e^{i(\sqrt{3}\beta^{(1)})L}$ e $e^{i(-\beta^{(1)} x'_2)}$ são fatores comuns não nulos, obtemos

$$= (a_2 a_3) a_1 e^{i(\alpha^{(1)})L} e^{i(-\alpha^{(1)} \sqrt{1}L)} - (a_1 a_2) a_3 e^{i(-\alpha^{(1)})L} e^{i(\alpha^{(1)} \sqrt{1}L)} = 0.$$

Igual conclusão se tem para os demais termos. Isso acontece pela mesma razão mencionada para o caso $\Phi^+(x'_1, 0) = 0$.

Portanto, a função de onda $\Phi^+(x'_1, x'_2)$ anula-se nas paredes. No entanto, isso não significa que seja uma solução válida, pois já sabemos que as equações de Bethe geradas pela condição $\Phi^+(x'_1, 0) = 0$ são inconsistentes!

Ainda que não houvesse essa inconsistência, as funções de onda $\Psi^-(x_1, x_2)$ e $\Phi^+(x'_1, x'_2)$ não são contínuas em $x_2 = \sqrt{3}x_1$. Para verificar essa afirmação, reescrevemos a $\Phi^+(x'_1, x'_2)$ em pares de ondas planas antes-depois de uma colisão p-p,

$$\begin{aligned} \Phi^+(x'_1, x'_2) = & -(\bar{a}_2 \bar{a}_3) a_1 e^{i(\alpha^{(2)} - \sqrt{3}\beta^{(2)})L} e^{i(-\alpha^{(2)} x'_1 + \beta^{(2)} x'_2)} - (\bar{a}_2 \bar{a}_3) \bar{a}_1 e^{i(-\alpha^{(1)} - \sqrt{3}\beta^{(1)})L} e^{i(\alpha^{(1)} x'_1 + \beta^{(1)} x'_2)} + \\ & + (a_2 a_3) a_1 e^{i(\alpha^{(1)} + \sqrt{3}\beta^{(1)})L} e^{i(-\alpha^{(1)} x'_1 - \beta^{(1)} x'_2)} + (a_2 a_3) \bar{a}_1 e^{i(-\alpha^{(2)} + \sqrt{3}\beta^{(2)})L} e^{i(\alpha^{(2)} x'_1 - \beta^{(2)} x'_2)} - \\ & - (a_1 a_2) \bar{a}_3 e^{i(\alpha^{(3)} - \sqrt{3}\beta^{(3)})L} e^{i(-\alpha^{(3)} x'_1 + \beta^{(3)} x'_2)} - (a_1 a_2) a_3 e^{i(-\alpha^{(1)} + \sqrt{3}\beta^{(1)})L} e^{i(\alpha^{(1)} x'_1 - \beta^{(1)} x'_2)} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + (\bar{a}_2 \bar{a}_1) \bar{a}_3 e^{i(\alpha^{(1)} - \sqrt{3}\beta^{(1)})L} e^{i(-\alpha^{(1)}x'_1 + \beta^{(1)}x'_2)} + (\bar{a}_2 \bar{a}_1) a_3 e^{i(-\alpha^{(3)} + \sqrt{3}\beta^{(3)})L} e^{i(\alpha^{(3)}x'_1 - \beta^{(3)}x'_2)} + \\
& + (a_1 \bar{a}_3) a_2 e^{i(-\alpha^{(3)} - \sqrt{3}\beta^{(3)})L} e^{i(\alpha^{(3)}x'_1 + \beta^{(3)}x'_2)} + (a_1 \bar{a}_3) \bar{a}_2 e^{i(-\alpha^{(2)} - \sqrt{3}\beta^{(2)})L} e^{i(\alpha^{(2)}x'_1 + \beta^{(2)}x'_2)} - \\
& - (a_3 \bar{a}_1) a_2 e^{i(\alpha^{(2)} + \sqrt{3}\beta^{(2)})L} e^{i(-\alpha^{(2)}x'_1 - \beta^{(2)}x'_2)} - (a_3 \bar{a}_1) a_3 e^{i(\alpha^{(3)} + \sqrt{3}\beta^{(3)})L} e^{i(-\alpha^{(3)}x'_1 - \beta^{(3)}x'_2)}. \quad (4.98)
\end{aligned}$$

Uma condição necessária para que $\Psi^-(x_1, x_2)$ e $\Phi^+(x'_1, x'_2)$ sejam contínuas em $x_2 = \sqrt{3}x_1$ é a primeira linha de $\Psi^-(x_1, x_2)$ da Eq. (4.84) ser contínua com a primeira linha da Eq. (4.98),

$$\psi^-(x_1, x_2) = (a_2 a_3) a_1 e^{i(\alpha^{(1)}x_1 + \beta^{(1)}x_2)} + (a_2 a_3) \bar{a}_1 e^{i(-\alpha^{(2)}x_1 + \beta^{(2)}x_2)},$$

$$\phi^+(x'_1, x'_2) = -(\bar{a}_2 \bar{a}_3) a_1 e^{i(\alpha^{(2)} - \sqrt{3}\beta^{(2)})L} e^{i(-\alpha^{(2)}x'_1 + \beta^{(2)}x'_2)} - (\bar{a}_2 \bar{a}_3) \bar{a}_1 e^{i(-\alpha^{(1)} - \sqrt{3}\beta^{(1)})L} e^{i(\alpha^{(1)}x'_1 + \beta^{(1)}x'_2)}.$$

Assim, notando que $\alpha^{(1)} + \sqrt{3}\beta^{(1)} = -\alpha^{(2)} + \sqrt{3}\beta^{(2)}$, a imposição $\psi^-(x_1, \sqrt{3}x_1) = \phi^+(x_1, \sqrt{3}x_1)$ conduz a

$$e^{i(\alpha^{(1)} + \sqrt{3}\beta^{(1)})L} = -\frac{\bar{a}_2 \bar{a}_3}{a_2 a_3}.$$

Para verificar a veracidade desse resultado, elevamos ao quadrado ambos os lados e usamos

$$e^{i2(\alpha^{(1)} + \sqrt{3}\beta^{(1)})L} = e^{i2\alpha^{(1)}L} e^{i2\sqrt{3}\beta^{(1)}L}$$

para, em seguida, substituir pelas equações de Bethe correspondentes, Eqs. (4.85) e (4.89).

O resultado é

$$\frac{\bar{a}_2}{a_2} = -1,$$

que é falso para todo $\tilde{\lambda}$ finito, pois $a_2 = 1 - \frac{i\tilde{\lambda}}{\beta}$.

Portanto, como as funções de onda $\Psi^-(x_1, x_2)$ e $\Phi^+(x_1, x_2)$ são descontínuas em $x_2 = \sqrt{3}x_1$, o uso da simetria de reflexão invertida é insuficiente para se ter uma solução por *Ansatz* de Bethe.

Essa descontinuidade ao longo da diagonal do retângulo é observada qualitativamente nos gráficos das partes real e imaginária das funções de onda $\Psi^-(x_1, x_2)$ e $\Phi^+(x'_1, x'_2)$ nas Figs. 4.6(a) e 4.6(b), respectivamente. Consequentemente, a função de onda

$$\Psi(x_1, x_2) = \left\{ \begin{array}{c} \Psi^-(x_1, x_2) \\ \Phi^+(x'_1, x'_2) \end{array} \right\},$$

também será descontínua na diagonal.

Por uma questão de comparação, as Figs. 4.7(a) e 4.7(b), ilustram as partes real e

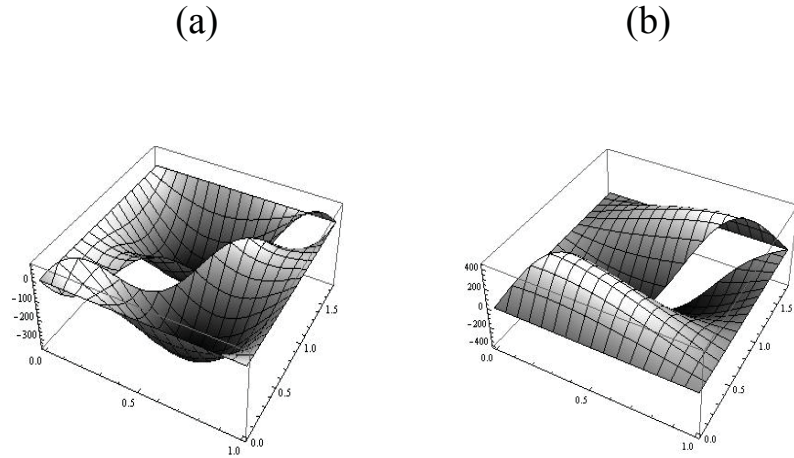


Figura 4.6: (a) Parte real da função de onda. (b) Parte imaginária da função de onda. A função de onda para $\gamma = 3$ é descontínua na diagonal, o que inviabiliza uma solução do tipo *Ansatz* de Bethe.

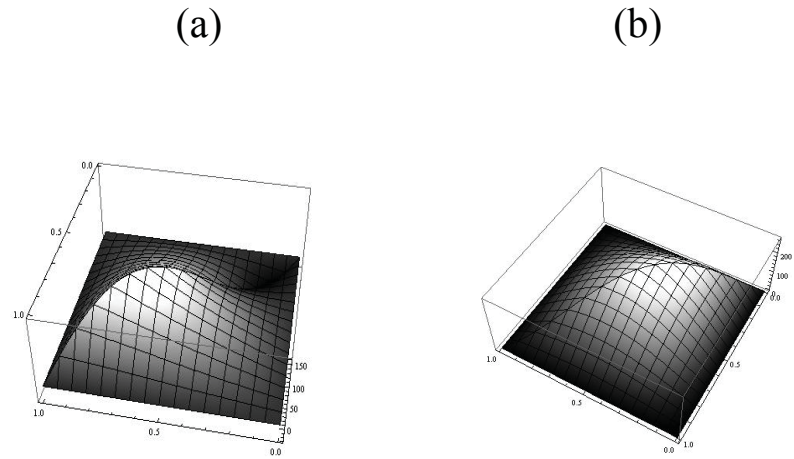


Figura 4.7: (a) Parte real da função de onda. (b) Parte imaginária da função de onda. A função de onda $\gamma = 1$ é contínua na diagonal.

imaginária da função de onda para $\gamma = 1$, no qual se observa a continuidade da função de onda na diagonal do bilhar quadrado.

É importante enfatizar que os “momentos” não estão quantizados, o que não é um problema, uma vez que a continuidade da função deve ser garantida antes disso.

3) Construção da função de onda via simetria especular

A solução *Ansatz* de Bethe para $\gamma = 1$ tem, naturalmente, a simetria especular e a simetria de reflexão invertida para a sua função de onda (confira a Fig. 4.2). Como mencionado anteriormente, no Capítulo 2 e na seção 4.1.2, soluções do tipo *Ansatz* têm a simetria de reflexão em sua estrutura matemática. Em vista disso, revisitamos a solução

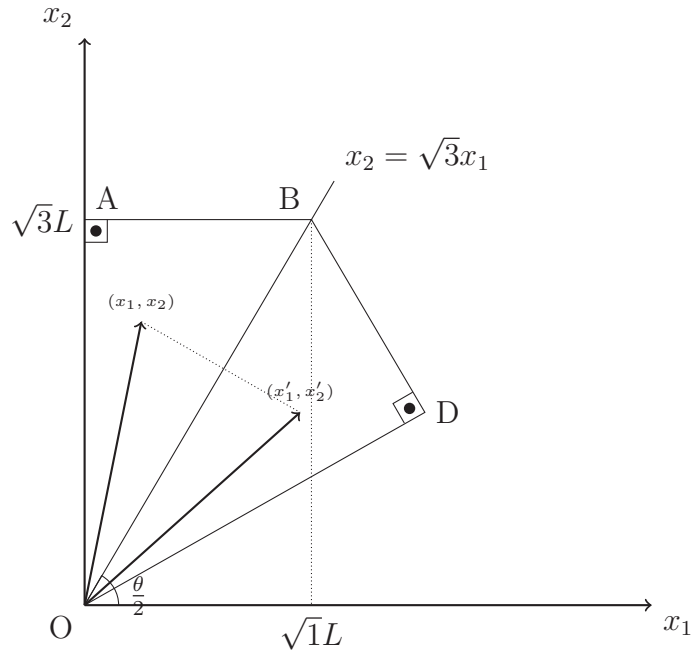


Figura 4.8: O espaço de configuração para o bilhar pipa com parede permeável é obtido refletindo-se em relação à hipotenusa o $\triangle OAB$, originando o $\triangle OBD$. Nesse caso, cada ponto (x_1, x_2) em $x_1 \leq \frac{x_2}{\sqrt{3}}$ corresponde a um ponto (x'_1, x'_2) em $x_1 \geq \frac{x_2}{\sqrt{3}}$.

para a função de onda $\Psi^+(x_1, x_2)$ para verificar se ela satisfaz as condições de contorno com o domínio refletido em relação a $x_2 = \sqrt{3}x_1$, gerando o bilhar pipa ou *kite* com parede permeável.

Considere a Fig. 4.8. A função de onda $\Psi^-(x_1, x_2)$ é válida no $\triangle OAB$ e desejamos determinar a função de onda $\Psi^+(x_1, x_2)$ no $\triangle OBD$. Então, calculamos as equações das bordas \overline{OD} e \overline{DB} , refletindo os segmentos \overline{OA} e \overline{AB} em relação ao segmento \overline{OB} . Definindo $R = x'_1 + ix'_2$, $R_0 = x_1 + ix_2$ e $\theta = \frac{2\pi}{3}$, pela equação de reflexão por um ângulo θ , $R = e^{i\theta} \overline{R_0}$ ⁴, temos

$$x'_1 = -\frac{1}{2}x_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}x_2, \quad (4.99a)$$

$$x'_2 = -\frac{\sqrt{3}}{2}x_1 + \frac{1}{2}x_2. \quad (4.99b)$$

Eliminando x_1 da Eq. (4.99a), obtemos

$$x'_2 = -\sqrt{3}x'_1 + 2x_2. \quad (4.100)$$

A equação da reta que passa pelo segmento \overline{AB} é $x_2 = \sqrt{3}L$. Então, pela Eq. (4.100), o

⁴Não há conflito com o uso na seção 4.1.2, pois essa equação de reflexão não está associada a nenhuma grandeza física específica.

segmento refletido \overline{BD} em relação à hipotenusa tem como equação

$$x'_2 = -\sqrt{3}x'_1 + 2\sqrt{3}L. \quad (4.101)$$

Para se determinar o segmento refletido de \overline{OA} em relação à hipotenusa, notemos que sua equação é $x_1 = 0$; logo, pela Eq. (4.99a), obtemos

$$x'_1 = \frac{\sqrt{3}}{2}x_2,$$

com a qual eliminamos x_2 na equação Eq. (4.99b). Consequentemente, a equação da reta que passa pelo segmento \overline{OD} é

$$x'_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}x'_1. \quad (4.102)$$

A função $\Psi^-(x_1, x_2)$ é nula no segmento \overline{OA} ($\Psi^-(0, x_2) = 0$); assim, $\Psi^+(x'_1, x'_2)$ deve ser nula também no segmento \overline{OD} . Para se verificar isso, basta fazer $x'_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}x'_1$ na Eq. (4.84), agora nas coordenadas (x'_1, x'_2) ; reunindo as ondas planas com os mesmos coeficientes,

$$\begin{aligned} \Psi^+ \left(x'_1, \frac{1}{\sqrt{3}}x'_1 \right) = & \\ = (a_2 a_3) a_1 [e^{i(-\alpha^{(2)} + \frac{\beta^{(2)}}{\sqrt{3}})x'_1} - e^{i(\alpha^{(3)} - \frac{\beta^{(3)}}{\sqrt{3}})x'_1}] + (a_2 a_3) \bar{a}_1 [e^{i(\alpha^{(1)} + \frac{\beta^{(1)}}{\sqrt{3}})x'_1} - e^{i(\alpha^{(3)} + \frac{\beta^{(3)}}{\sqrt{3}})x'_1}] + & \\ + (\bar{a}_2 \bar{a}_3) a_1 [e^{i(-\alpha^{(3)} - \frac{\beta^{(3)}}{\sqrt{3}})x'_1} - e^{i(-\alpha^{(1)} - \frac{\beta^{(1)}}{\sqrt{3}})x'_1}] + (\bar{a}_2 \bar{a}_3) \bar{a}_1 [e^{i(-\alpha^{(3)} + \frac{\beta^{(3)}}{\sqrt{3}})x'_1} - e^{i(\alpha^{(2)} - \frac{\beta^{(2)}}{\sqrt{3}})x'_1}] + & \\ + (\bar{a}_2 \bar{a}_1) a_3 [e^{i(\alpha^{(1)} - \frac{\beta^{(1)}}{\sqrt{3}})x'_1} - e^{i(\alpha^{(2)} + \frac{\beta^{(2)}}{\sqrt{3}})x'_1}] + (a_1 a_2) \bar{a}_3 [e^{i(-\alpha^{(2)} - \frac{\beta^{(2)}}{\sqrt{3}})x'_1} - e^{i(-\alpha^{(1)} + \frac{\beta^{(1)}}{\sqrt{3}})x'_1}] & \end{aligned}$$

e notando que

$$\begin{aligned} \frac{\beta^{(2)}}{\sqrt{3}} - \alpha^{(2)} &= \frac{2\beta}{\sqrt{3}} = -\frac{\beta^{(3)}}{\sqrt{3}} + \alpha^{(3)}, \\ \frac{\beta^{(3)}}{\sqrt{3}} + \alpha^{(3)} &= \frac{\beta}{\sqrt{3}} + \alpha, \\ \frac{\beta^{(2)}}{\sqrt{3}} + \alpha^{(2)} &= -\frac{\beta}{\sqrt{3}} + \alpha, \end{aligned}$$

os três termos entre colchetes são nulos, ou seja, $\Psi^+ \left(x'_1, \frac{1}{\sqrt{3}}x'_1 \right) = 0$.

De maneira análoga, como $\Psi^-(x_1, x_2)$ é nula no segmento \overline{AB} ($\Psi^-(x_1, \sqrt{3}L) = 0$), a função de onda $\Psi^+(x'_1, x'_2)$ deve ser nula no segmento \overline{BD} ; para verificar esse resultado, consideramos $x'_2 = -\sqrt{3}x'_1 + 2\sqrt{3}L$ e as equações de Bethe em $\Psi^+(x'_1, x'_2)$, resultando em $\Psi^+(x'_1, -\sqrt{3}x'_1 + 2\sqrt{3}L) = 0$.

Portanto, temos as condições necessárias para a Eq. (4.84) ser a função de onda válida no $\triangle OBD$ da Fig. 4.8. No entanto, como $\Psi^+(x'_1, -\sqrt{3}x'_1 + 2\sqrt{3}L) = 0$ porque $\Psi^-(x_1, \sqrt{3}L) = 0$, e lembrando que esta condição gera equações de Bethe inconsistentes, comprometendo a quantização da solução, isso significa também que não é possível estabelecer a quantização para $\Psi^+(x'_1, x'_2)$. Portanto, o bilhar pipa com parede permeável não pode ser descrito por uma solução do tipo *Ansatz* de Bethe, apesar da simetria de reflexão. Essa conclusão é condizente com resultados da literatura: quando a partícula é transmitida através da parede permeável, momentaneamente esse bilhar comporta-se como um bilhar pipa sem parede em sua diagonal, o qual é pseudointegrável [185] e, por isso, também não admite uma solução do tipo *Ansatz* de Bethe. No final da subseção 5.4.1, esboçamos uma interpretação topológica para o bilhar pipa com parede permeável.

4.2.6 E as Soluções para Outros Bilhares Triângulo Retângulo Racionais?

A maioria dos bilhares triângulo retângulo racionais são pseudointegráveis, pois o seu *genus* é maior do que 1. Em vista disso, é natural supor que bilhares retangulares, com parede permeável em sua diagonal, formados por esses bilhares triangulares (veja a Fig. 4.1(b)), não admitam solução do tipo *Ansatz* de Bethe. Justificamos esse resultado usando o **CL**, uma das condições necessárias para se determinar os coeficientes “*A*” da função de onda estendida da seção 4.2, estabelecendo que a função de onda de um bilhar retangular se reduza a de um bilhar triângulo retângulo no limite infinito da intensidade do potencial. Nos casos classicamente integráveis, $\gamma = 1$ e $\gamma = 3$, as funções de onda nesse limite são, respectivamente,

$$\begin{aligned}\Psi_{\text{tri}}(x_1, x_2) &= -4 \left(\sin(\alpha x_1) \sin(\beta x_2) - \sin(\beta x_1) \sin(\alpha x_2) \right), \\ \Psi_{\text{th}}(x_1, x_2) &= \\ &= -4 \left(\sin(\alpha^{(1)} x_1) \sin(\beta^{(1)} x_2) + \sin(\alpha^{(2)} x_1) \sin(\beta^{(2)} x_2) - \sin(\alpha^{(3)} x_1) \sin(\beta^{(3)} x_2) \right).\end{aligned}$$

Então, é razoável supor que a função de onda para os demais bilhares triângulo retângulo racionais, $\Psi_{\text{tr}}(x_1, x_2)$, seja uma superposição de n produtos de funções seno, $\sin(\alpha^{(l)} x_1) \sin(\beta^{(l)} x_2)$. Esta suposição origina dois problemas.

O primeiro deles, é a arbitrariedade dos sinais entre as parcelas de $\sin(\alpha^{(l)} x_1) \sin(\beta^{(l)} x_2)$.

					+-+++++
		+-+-+	+-+-++	+-+-++-	+-+-++++
+-	++-	+-+-	+-+-+-	+-+-+-	+-+-+-+
n = 2	n = 3	n = 4	n = 5	n = 6	n = 7

Figura 4.9: Arranjo de sinais para a expansão da função de onda em uma superposição finita de $\text{sen}(\alpha^{(l)}x_1)\text{sen}(\beta^{(l)}x_2)$ em função de n . Observe que não estão presentes todas as combinações possíveis de sinais $+$ e $-$, pois as que faltam são o negativo das combinações apresentadas. Por exemplo, para $n = 5$, a combinação $+- - + -$ está ausente por ser o negativo de $(- + + - +) = (+ - + - +)$.

Por exemplo, para $n = 4$, temos três possibilidades a princípio,

$$\Psi_{\text{tr}}(x_1, x_2) =$$

$$= -4 \left\{ \begin{array}{l} \text{sen}(\alpha^{(1)}x_1)\text{sen}(\beta^{(1)}x_2) + \text{sen}(\alpha^{(2)}x_1)\text{sen}(\beta^{(2)}x_2) + \text{sen}(\alpha^{(3)}x_1)\text{sen}(\beta^{(3)}x_2) + \\ \quad \text{sen}(\alpha^{(4)}x_1)\text{sen}(\beta^{(4)}x_2) \\ \text{sen}(\alpha^{(1)}x_1)\text{sen}(\beta^{(1)}x_2) + \text{sen}(\alpha^{(2)}x_1)\text{sen}(\beta^{(2)}x_2) + \text{sen}(\alpha^{(3)}x_1)\text{sen}(\beta^{(3)}x_2) - \\ \quad \text{sen}(\alpha^{(4)}x_1)\text{sen}(\beta^{(4)}x_2) \\ \text{sen}(\alpha^{(1)}x_1)\text{sen}(\beta^{(1)}x_2) + \text{sen}(\alpha^{(2)}x_1)\text{sen}(\beta^{(2)}x_2) - \text{sen}(\alpha^{(3)}x_1)\text{sen}(\beta^{(3)}x_2) - \\ \quad \text{sen}(\alpha^{(4)}x_1)\text{sen}(\beta^{(4)}x_2) \end{array} \right. \quad (4.103)$$

Como o sistema é um bilhar triangular, a primeira possibilidade na equação acima tem que ser descartada, pois todas as parcelas tem o mesmo sinal, impedindo que a função de onda se anule na hipotenusa. Então, a arbitrariedade de sinais limita-se às duas outras possibilidades.

Uma possível saída para esse exemplo é considerar as duas possibilidades para determinar os sinais dos coeficientes das ondas planas. No entanto, se assim for, à medida que se aumenta n , o número de possibilidades de funções de onda correspondentes ao limite $\tilde{\lambda} \rightarrow \infty$ pode aumentar, como exemplificado no arranjo de sinais em função de n na Fig. 4.9, no qual o número de possibilidades aumenta de 1 para 3 quando n varia de 2 para 7, dificultando a determinação dos sinais dos coeficientes “ A ”.

Ainda que se tenha um apoio computacional para encontrar todas as combinações de sinais relevantes e, por conseguinte, a relação entre os coeficientes das expansões da função de onda, há um segundo problema: a impossibilidade de se obter a quantização da função de onda, devido à incomensurabilidade entre números racionais e irracionais.

Para mostrar esse resultado, precisamos do seguinte teorema [186]:

Teorema: Se $\tilde{\theta}$ é racional em graus, então os únicos valores racionais possíveis das funções trigonométricas são:

$$\sin \tilde{\theta}, \cos \tilde{\theta} = 0, \pm \frac{1}{2}, \pm 1.$$

Assumindo que as funções de onda em bilhares triângulo retângulo racionais sejam uma combinação finita de produtos de senos,

$$\Psi_{\text{tr}}(x_1, x_2) = \sum_{l=1}^n \sin(\alpha^{(l)} x_1) \sin(\beta^{(l)} x_2),$$

para um l fixo, como $l = 1$ (e comprimento $L = 1$), temos,

$$\sin(\alpha^{(1)} x_1) = \sin(\alpha^{(1)} \sqrt{m_1}) = 0 \Rightarrow \alpha^{(1)} = \frac{\mathfrak{M}\pi}{\sqrt{m_1}},$$

e

$$\sin(\beta^{(1)} \sqrt{m_2}) = 0 \Rightarrow \beta^{(1)} = \frac{\mathfrak{N}\pi}{\sqrt{m_1}},$$

com \mathfrak{M} e \mathfrak{N} inteiros.

Ora, sendo $\alpha^{(2)}$ e $\beta^{(2)}$ os momentos depois de uma colisão entre as partículas com momentos iniciais $\alpha^{(1)}$ e $\beta^{(1)}$ (sempre é possível encontrar um par de momentos antes e depois de uma colisão p-p, e os índices são arbitrários), temos, da nossa análise clássica do Capítulo 2,

$$\alpha^{(2)} = \alpha \cos \theta - \beta \sin \theta,$$

$$\beta^{(2)} = \alpha \sin \theta + \beta \cos \theta,$$

em que $\alpha^{(1)} = \alpha$ e $\beta^{(1)} = \beta$.

É suficiente analisarmos a primeira equação. Como devemos ter a condição de quantização

$$\sin(\alpha^{(2)} \sqrt{m_1}) = 0,$$

segue-se que

$$\sin \left[\left(\mathfrak{M} \cos \theta - \frac{\mathfrak{N}}{\sqrt{\gamma}} \sin \theta \right) \pi \right] = 0$$

se, e só se,

$$\mathfrak{M} \cos \theta - \frac{\mathfrak{N}}{\sqrt{\gamma}} \sin \theta = \mathfrak{K}, \quad (4.104)$$

em que \mathfrak{K} é uma contante inteira. Isso significa que o lado esquerdo dessa equação precisa ser inteiro. Então, lembrando que

$$\cos \theta = \frac{1 - \gamma}{1 + \gamma}, \quad \sin \theta = \frac{2\sqrt{\gamma}}{1 + \gamma},$$

os únicos valores de γ que tornam $\cos \theta$ e $\sin \theta$ racionais para haver inteiros \mathfrak{M} e \mathfrak{N} satisfazendo a Eq. (4.104) são, pelo Teorema acima, $\gamma = 1$ (bilhar triângulo retângulo isósceles), $\gamma = 3$ e $\gamma = \frac{1}{3}$ (bilhares hemiequiláteros).

Este resultado concorda com uma demonstração mais rigorosa dada por Brian J. McCartin [187], estabelecendo que apenas o retângulo, o triângulo retângulo isósceles, o triângulo hemiequilátero e o triângulo equilátero admitem, como soluções, uma superposição finita de funções trigonométricas e, por conseguinte, por superposição finita de ondas planas.

Na seção seguinte, ignoramos, por ora, as restrições discutidas aqui e aplicamos a análise desenvolvida nas seções anteriores para o caso mais simples de um bilhar triângulo retângulo classicamente pseudointegrável, no intuito de identificar as semelhanças e diferenças em relação ao caso $\gamma = 3$.

Função de Onda para $\gamma = \frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}-1}$

O bilhar retangular com parede permeável em sua diagonal para $\gamma = \frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}-1}$ é formado por dois triângulos retângulos com ângulos internos agudos iguais a $\frac{\pi}{8}$ e $\frac{3\pi}{8}$. Nesse caso, $\frac{\theta}{\pi} = \frac{3}{4}$, ou seja, $\mathfrak{m} = 3$ e $\mathfrak{n} = 4$. De acordo com a Eq. (4.36), a função de onda é a expansão de 16 ondas planas

$$\begin{aligned} \Psi(x_1, x_2) = & A_1 \begin{Bmatrix} a_1 \\ \bar{a}_1 \end{Bmatrix} e^{i(\alpha^{(1)}x_1 + \beta^{(1)}x_2)} + A_4 \begin{Bmatrix} \bar{a}_4 \\ a_4 \end{Bmatrix} e^{i(\alpha^{(1)}x_1 - \beta^{(1)}x_2)} + \\ & + B_1 \begin{Bmatrix} \bar{a}_1 \\ a_1 \end{Bmatrix} e^{i(-\alpha^{(1)}x_1 - \beta^{(1)}x_2)} + B_4 \begin{Bmatrix} a_4 \\ \bar{a}_4 \end{Bmatrix} e^{i(-\alpha^{(1)}x_1 + \beta^{(1)}x_2)} + \\ & + A_2 \begin{Bmatrix} a_2 \\ \bar{a}_2 \end{Bmatrix} e^{i(\alpha^{(2)}x_1 + \beta^{(2)}x_2)} + A_1 \begin{Bmatrix} \bar{a}_1 \\ a_1 \end{Bmatrix} e^{i(-\alpha^{(2)}x_1 + \beta^{(2)}x_2)} + \\ & + B_2 \begin{Bmatrix} \bar{a}_2 \\ a_2 \end{Bmatrix} e^{i(-\alpha^{(2)}x_1 - \beta^{(2)}x_2)} + B_1 \begin{Bmatrix} a_1 \\ \bar{a}_1 \end{Bmatrix} e^{i(\alpha^{(2)}x_1 - \beta^{(2)}x_2)} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + A_3 \begin{Bmatrix} a_3 \\ \bar{a}_3 \end{Bmatrix} e^{i(\alpha^{(3)}x_1 + \beta^{(3)}x_2)} + A_2 \begin{Bmatrix} \bar{a}_2 \\ a_2 \end{Bmatrix} e^{i(-\alpha^{(3)}x_1 + \beta^{(3)}x_2)} + \\
& + B_3 \begin{Bmatrix} \bar{a}_3 \\ a_3 \end{Bmatrix} e^{i(-\alpha^{(3)}x_1 - \beta^{(3)}x_2)} + B_2 \begin{Bmatrix} a_2 \\ \bar{a}_2 \end{Bmatrix} e^{i(\alpha^{(3)}x_1 - \beta^{(3)}x_2)} + \\
& + A_4 \begin{Bmatrix} a_4 \\ \bar{a}_4 \end{Bmatrix} e^{i(-\alpha^{(4)}x_1 + \beta^{(4)}x_2)} + A_3 \begin{Bmatrix} \bar{a}_3 \\ a_3 \end{Bmatrix} e^{i(\alpha^{(4)}x_1 + \beta^{(4)}x_2)} + \\
& + B_3 \begin{Bmatrix} a_3 \\ \bar{a}_3 \end{Bmatrix} e^{i(-\alpha^{(4)}x_1 - \beta^{(4)}x_2)} + B_4 \begin{Bmatrix} \bar{a}_4 \\ a_4 \end{Bmatrix} e^{i(\alpha^{(4)}x_1 - \beta^{(4)}x_2)}. \tag{4.105}
\end{aligned}$$

Como $2m > n$, os coeficientes “ A ” e “ B ” são determinados pelas Eqs. (4.55)-(4.57),

$$A_1 = \pm a_4 a_2, \quad A_2 = \pm \bar{a}_1 a_3, \quad A_3 = \pm \bar{a}_2 a_4, \quad A_4 = \pm \bar{a}_1 \bar{a}_3, \tag{4.106}$$

$$B_1 = \pm \bar{a}_4 \bar{a}_2, \quad B_2 = \pm a_1 \bar{a}_3, \quad B_3 = \pm \bar{a}_4 a_2, \quad B_4 = \pm a_1 a_3. \tag{4.107}$$

O **CL** aplicado à função de onda $\Psi^-(x_1, x_2)$ deve reduzi-la a qualquer uma das seguintes funções de onda

$$\begin{aligned}
\Psi_{\text{tr1}}(x_1, x_2) = & -4 \left(\sin(\alpha^{(1)}x_1) \sin(\beta^{(1)}x_2) + \sin(\alpha^{(2)}x_1) \sin(\beta^{(2)}x_2) \right. \\
& \left. + \sin(\alpha^{(3)}x_1) \sin(\beta^{(3)}x_2) - \sin(\alpha^{(4)}x_1) \sin(\beta^{(4)}x_2) \right), \tag{4.108}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Psi_{\text{tr2}}(x_1, x_2) = & -4 \left(\sin(\alpha^{(1)}x_1) \sin(\beta^{(1)}x_2) + \sin(\alpha^{(2)}x_1) \sin(\beta^{(2)}x_2) \right. \\
& \left. - \sin(\alpha^{(3)}x_1) \sin(\beta^{(3)}x_2) - \sin(\alpha^{(4)}x_1) \sin(\beta^{(4)}x_2) \right). \tag{4.109}
\end{aligned}$$

O limite $\tilde{\lambda} \rightarrow \infty$ da Eq. (4.105) é qualquer uma das Eqs. (4.108) ou (4.109) desde que

$$\lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{B_1 \bar{a}_1}{A_1 a_1} = 1, \quad \lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{B_1}{A_1} = \lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{\bar{a}_1}{a_1} = -1, \tag{4.110}$$

$$\lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{A_4 \bar{a}_4}{A_1 a_1} = \lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{B_4 a_4}{A_1 a_1} = -1, \quad \lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{A_2 a_2}{A_1 a_1} = \lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{B_2 \bar{a}_2}{A_1 a_1} = 1, \tag{4.111}$$

$$\lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{A_3 \bar{a}_3}{A_1 a_1} = \lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{B_3 a_3}{A_1 a_1} = -1, \quad \lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{B_4 \bar{a}_4}{A_1 a_1} = \lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{A_4 a_4}{A_1 a_1} = 1, \tag{4.112}$$

$$\lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{A_3 a_3}{A_1 a_1} = \lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{B_3 \bar{a}_3}{A_1 a_1} = \pm 1, \quad \lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{A_2 \bar{a}_2}{A_1 a_1} = \lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{B_2 a_2}{A_1 a_1} = \mp 1. \tag{4.113}$$

Os sinais superiores referem-se à Eq. (4.108) e os inferiores, à Eq. (4.109). No entanto, substituindo os coeficientes “ A ” e “ B ” das Eqs. (4.106), nem todos vão satisfazer os limites acima, pois é necessário completá-los com os coeficientes “ a ”. Por exemplo, temos

$$\lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{A_4 \bar{a}_4}{A_1 a_1} = \lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{\bar{a}_1 \bar{a}_3 \bar{a}_4}{a_4 a_2 a_1} \neq -1.$$

Para se ter o resultado desejado, uma possibilidade é redefinir os coeficientes: $A_1 = a_4 a_3 a_2$ e $A_4 = -\bar{a}_1 \bar{a}_2 \bar{a}_3$.

Para completar os coeficientes, fixamos inicialmente $A_1 = a_4 a_2$ e substituímos os demais na Eq. (4.105) para determinar quais “ a ” devem ser incluídos, respeitando as condições **CI** (anulamento de ondas planas de mesmo índice), **CII** (preservação da solução base) e os limites calculados acima. Para ilustrar esse procedimento, considere uma parte da função de onda $\Psi(x_1, x_2)$ formada pelas ondas planas com $l = 1$ e suas respectivas ondas planas do par antes-depois de uma colisão p-p escritas à direita,

$$\begin{aligned} \psi_1(x_1, x_2) &= \\ &= A_1 \begin{Bmatrix} a_1 \\ \bar{a}_1 \end{Bmatrix} e^{i(\alpha^{(1)}x_1 + \beta^{(1)}x_2)} + A_1 \begin{Bmatrix} \bar{a}_1 \\ a_1 \end{Bmatrix} e^{i(-\alpha^{(2)}x_1 + \beta^{(2)}x_2)} + \\ &+ B_1 \begin{Bmatrix} \bar{a}_1 \\ a_1 \end{Bmatrix} e^{i(-\alpha^{(1)}x_1 - \beta^{(1)}x_2)} B_1 \begin{Bmatrix} a_1 \\ \bar{a}_1 \end{Bmatrix} e^{i(\alpha^{(2)}x_1 - \beta^{(2)}x_2)} + \\ &+ A_4 \begin{Bmatrix} \bar{a}_4 \\ a_4 \end{Bmatrix} e^{i(\alpha^{(1)}x_1 - \beta^{(1)}x_2)} + A_4 \begin{Bmatrix} a_4 \\ \bar{a}_4 \end{Bmatrix} e^{i(-\alpha^{(4)}x_1 + \beta^{(4)}x_2)} \\ &+ B_4 \begin{Bmatrix} a_4 \\ \bar{a}_4 \end{Bmatrix} e^{i(-\alpha^{(1)}x_1 + \beta^{(1)}x_2)} + B_4 \begin{Bmatrix} \bar{a}_4 \\ a_4 \end{Bmatrix} e^{i(\alpha^{(4)}x_1 - \beta^{(4)}x_2)} = \\ &= \begin{Bmatrix} (a_4 a_2) a_1 \\ (\pm a_4 a_2) \bar{a}_1 \end{Bmatrix} e^{i(\alpha^{(1)}x_1 + \beta^{(1)}x_2)} + \begin{Bmatrix} (\pm a_4 a_2) \bar{a}_1 \\ (\pm a_4 a_2) a_1 \end{Bmatrix} e^{i(-\alpha^{(2)}x_1 + \beta^{(2)}x_2)} + \\ &+ \begin{Bmatrix} (\pm \bar{a}_4 \bar{a}_2) \bar{a}_1 \\ (\pm \bar{a}_4 \bar{a}_2) a_1 \end{Bmatrix} e^{i(-\alpha^{(1)}x_1 - \beta^{(1)}x_2)} \begin{Bmatrix} (\pm \bar{a}_4 \bar{a}_2) a_1 \\ (\pm \bar{a}_4 \bar{a}_2) \bar{a}_1 \end{Bmatrix} e^{i(\alpha^{(2)}x_1 - \beta^{(2)}x_2)} + \\ &+ \begin{Bmatrix} (\pm \bar{a}_1 \bar{a}_3) \bar{a}_4 \\ (\pm \bar{a}_1 \bar{a}_3) a_4 \end{Bmatrix} e^{i(\alpha^{(1)}x_1 - \beta^{(1)}x_2)} + \begin{Bmatrix} (\pm \bar{a}_1 \bar{a}_3) a_4 \\ (\pm \bar{a}_1 \bar{a}_3) \bar{a}_4 \end{Bmatrix} e^{i(-\alpha^{(4)}x_1 + \beta^{(4)}x_2)} \\ &+ \begin{Bmatrix} (\pm a_1 a_3) a_4 \\ (\pm a_1 a_3) \bar{a}_4 \end{Bmatrix} e^{i(-\alpha^{(1)}x_1 + \beta^{(1)}x_2)} + \begin{Bmatrix} (\pm a_1 a_3) \bar{a}_4 \\ (\pm a_1 a_3) a_4 \end{Bmatrix} e^{i(\alpha^{(4)}x_1 - \beta^{(4)}x_2)}. \end{aligned}$$

A análise partirá da função de onda $\psi_1^-(x_1, x_2)$, e todas as mudanças nela feitas, também serão feitas paralelamente na $\psi_1^+(x_1, x_2)$, a fim de garantir a continuidade da função de onda na diagonal do bilhar.

Considerando a onda plana em vermelho, ela deve se anular com a onda plana em laranja em $x_1 = 0$. Por **CI**, a onda plana em vermelho deve ser completada com o coeficiente a_3 e a onda plana em laranja, deve ser completada com a_2 em vermelho mantendo apenas o sinal negativo. Consequentemente, por **CII**, os pares antes-depois de uma colisão p-p das ondas planas vermelho e laranja devem ter seus coeficientes também completados por a_3 e a_2 . O mesmo procedimento é aplicado aos complexos conjugados das ondas planas com $l = 1$. Indicando por cores os coeficientes incluídos ou modificados na função de onda, temos

$$\begin{aligned} \psi_1(x_1, x_2) = & \left\{ \begin{array}{c} (\textcolor{red}{a}_4 \textcolor{red}{a}_2 \textcolor{blue}{a}_3) \textcolor{red}{a}_1 \\ (a_4 a_2 \textcolor{blue}{a}_3) \bar{a}_1 \end{array} \right\} e^{i(\alpha^{(1)}x_1 + \beta^{(1)}x_2)} + \left\{ \begin{array}{c} (a_4 a_2 \textcolor{blue}{a}_3) \bar{a}_1 \\ (a_4 a_2 \textcolor{blue}{a}_3) a_1 \end{array} \right\} e^{i(-\alpha^{(2)}x_1 + \beta^{(2)}x_2)} + \\ & + \left\{ \begin{array}{c} (\bar{a}_4 \bar{a}_2 \textcolor{green}{a}_3) \bar{a}_1 \\ (\bar{a}_4 \bar{a}_2 \textcolor{green}{a}_3) a_1 \end{array} \right\} e^{i(-\alpha^{(1)}x_1 - \beta^{(1)}x_2)} + \left\{ \begin{array}{c} (\bar{a}_4 \bar{a}_2 \textcolor{green}{a}_3) a_1 \\ (\bar{a}_4 \bar{a}_2 \textcolor{green}{a}_3) \bar{a}_1 \end{array} \right\} e^{i(\alpha^{(2)}x_1 - \beta^{(2)}x_2)} + \\ & + \left\{ \begin{array}{c} (-\bar{a}_1 \bar{a}_3 \textcolor{green}{a}_2) \bar{a}_4 \\ (-\bar{a}_1 \bar{a}_3 \textcolor{green}{a}_2) a_4 \end{array} \right\} e^{i(\alpha^{(1)}x_1 - \beta^{(1)}x_2)} + \left\{ \begin{array}{c} (-\bar{a}_1 \bar{a}_3 \textcolor{green}{a}_2) a_4 \\ (-\bar{a}_1 \bar{a}_3 \textcolor{green}{a}_2) \bar{a}_4 \end{array} \right\} e^{i(-\alpha^{(4)}x_1 + \beta^{(4)}x_2)} \\ & + \left\{ \begin{array}{c} (-\textcolor{red}{a}_1 \textcolor{red}{a}_3 \textcolor{blue}{a}_2) \textcolor{red}{a}_4 \\ (-a_1 a_3 \textcolor{blue}{a}_2) \bar{a}_4 \end{array} \right\} e^{i(-\alpha^{(1)}x_1 + \beta^{(1)}x_2)} + \left\{ \begin{array}{c} (-a_1 a_3 \textcolor{blue}{a}_2) \bar{a}_4 \\ (-a_1 a_3 \textcolor{blue}{a}_2) a_4 \end{array} \right\} e^{i(\alpha^{(4)}x_1 - \beta^{(4)}x_2)}, \end{aligned}$$

ou seja, os coeficientes A_1 , B_1 , A_4 e B_4 são redefinidos como

$$A_1 = a_4 a_3 a_2, \quad B_1 = \bar{a}_4 \bar{a}_3 \bar{a}_2, \quad A_4 = -\bar{a}_1 \bar{a}_2 \bar{a}_3, \quad B_4 = -a_1 a_2 a_3,$$

e concordam com os limites acima calculados. Assim, a partir deles, calculamos os coeficientes restantes, usando a condição de contorno $\Psi^-(0, x_2) = 0$:

$$A_2 = -a_4 a_3 \bar{a}_1, \quad B_2 = -\bar{a}_4 \bar{a}_3 a_1, \quad A_3 = \bar{a}_1 \bar{a}_2 a_4, \quad B_3 = a_1 a_2 \bar{a}_4.$$

Com essas definições, os limites das Eqs. (4.110)-(4.113) são satisfeitas e, em especial, aqueles limites com sinais superiores,

$$\lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{A_3 a_3}{A_1 a_1} = \lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{B_3 \bar{a}_3}{A_1 a_1} = 1, \quad \lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{A_2 \bar{a}_2}{A_1 a_1} = \lim_{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{B_2 a_2}{A_1 a_1} = -1, \quad (4.114)$$

correspondendo a função de onda da Eq. (4.108), com um único sinal negativo. Este

resultado é decorrente de o coeficiente $B_1 = \bar{A}_1$, satisfazendo o limite da Eq. (4.110). Poderíamos definir também $B_1 = \bar{A}_1$ condizente com a Eq. (4.110), como $B_1 = -\bar{a}_4\bar{a}_2a_3$ com o intuito de obter a Eq. (4.109), mas isso implicaria que $B_1 \neq \pm\bar{A}_1$, uma das condições necessárias estabelecida na seção 4.2.1. Logo, pelo menos neste exemplo particular, foi possível remover a ambiguidade de sinais para a aplicação do **CL**.

A função de onda explícita é,

$$\begin{aligned}
\Psi(x_1, x_2) = & \left\{ \begin{array}{c} (a_4a_3a_2)a_1 \\ (a_4a_3a_2)\bar{a}_1 \end{array} \right\} e^{i(\alpha^{(1)}x_1+\beta^{(1)}x_2)} + \left\{ \begin{array}{c} (-\bar{a}_1\bar{a}_2\bar{a}_3)\bar{a}_4 \\ (-\bar{a}_1\bar{a}_2\bar{a}_3)a_4 \end{array} \right\} e^{i(\alpha^{(1)}x_1-\beta^{(1)}x_2)} + \\
& + \left\{ \begin{array}{c} (\bar{a}_4\bar{a}_3\bar{a}_2)\bar{a}_1 \\ (\bar{a}_4\bar{a}_3\bar{a}_2)a_1 \end{array} \right\} e^{i(-\alpha^{(1)}x_1-\beta^{(1)}x_2)} + \left\{ \begin{array}{c} (-a_1a_2a_3)a_4 \\ (-a_1a_2a_3)\bar{a}_4 \end{array} \right\} e^{i(-\alpha^{(1)}x_1+\beta^{(1)}x_2)} + \\
& + \left\{ \begin{array}{c} (-a_4a_3\bar{a}_1)a_2 \\ (-a_4a_3\bar{a}_1)\bar{a}_2 \end{array} \right\} e^{i(\alpha^{(2)}x_1+\beta^{(2)}x_2)} + \left\{ \begin{array}{c} (a_4a_3a_2)\bar{a}_1 \\ (a_4a_3a_2)a_1 \end{array} \right\} e^{i(-\alpha^{(2)}x_1+\beta^{(2)}x_2)} + \\
& + \left\{ \begin{array}{c} (-\bar{a}_4\bar{a}_3a_1)\bar{a}_2 \\ (-\bar{a}_4\bar{a}_3a_1)a_2 \end{array} \right\} e^{i(-\alpha^{(2)}x_1-\beta^{(2)}x_2)} + \left\{ \begin{array}{c} (\bar{a}_4\bar{a}_3\bar{a}_2)a_1 \\ (\bar{a}_4\bar{a}_3\bar{a}_2)\bar{a}_1 \end{array} \right\} e^{i(\alpha^{(2)}x_1-\beta^{(2)}x_2)} + \\
& + \left\{ \begin{array}{c} (\bar{a}_1\bar{a}_2a_4)a_3 \\ (\bar{a}_1\bar{a}_2a_4)\bar{a}_3 \end{array} \right\} e^{i(\alpha^{(3)}x_1+\beta^{(3)}x_2)} + \left\{ \begin{array}{c} (-a_4a_3\bar{a}_1)\bar{a}_2 \\ (-a_4a_3\bar{a}_1)a_2 \end{array} \right\} e^{i(-\alpha^{(3)}x_1+\beta^{(3)}x_2)} + \\
& + \left\{ \begin{array}{c} (a_1a_2\bar{a}_4)\bar{a}_3 \\ (a_1a_2\bar{a}_4)a_3 \end{array} \right\} e^{i(-\alpha^{(3)}x_1-\beta^{(3)}x_2)} + \left\{ \begin{array}{c} (-\bar{a}_4\bar{a}_3a_1)a_2 \\ (-\bar{a}_4\bar{a}_3a_1)\bar{a}_2 \end{array} \right\} e^{i(\alpha^{(3)}x_1-\beta^{(3)}x_2)} + \\
& + \left\{ \begin{array}{c} (-\bar{a}_1\bar{a}_2\bar{a}_3)a_4 \\ (-\bar{a}_1\bar{a}_2\bar{a}_3)\bar{a}_4 \end{array} \right\} e^{i(-\alpha^{(4)}x_1+\beta^{(4)}x_2)} + \left\{ \begin{array}{c} (\bar{a}_1\bar{a}_2a_4)\bar{a}_3 \\ (\bar{a}_1\bar{a}_2a_4)a_3 \end{array} \right\} e^{i(\alpha^{(4)}x_1+\beta^{(4)}x_2)} + \\
& + \left\{ \begin{array}{c} (a_1a_2\bar{a}_4)a_3 \\ (a_1a_2\bar{a}_4)\bar{a}_3 \end{array} \right\} e^{i(-\alpha^{(4)}x_1-\beta^{(4)}x_2)} + \left\{ \begin{array}{c} (-a_1a_2a_3)\bar{a}_4 \\ (-a_1a_2a_3)a_4 \end{array} \right\} e^{i(\alpha^{(4)}x_1-\beta^{(4)}x_2)}. \quad (4.115)
\end{aligned}$$

Nesta função de onda, a condição de contorno $\Psi^-(0, x_2) = 0$ é satisfeita, mas não a condição $\Psi^+(x_1, 0) = 0$, uma estrutura semelhante àquela do caso $\gamma = 3$. Assim, se a função de onda da Eq. (4.108) realmente fosse a função de onda do bilhar triângulo retângulo para $\gamma = \frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}-1}$, ainda assim teríamos as mesmas inconsistências com as condições de contorno e as falhas das abordagens alternativas discutidas para $\gamma = 3$. Portanto, este caso, assim como os demais bilhares semelhantes, a função de onda é determinada apenas por recursos numéricos.

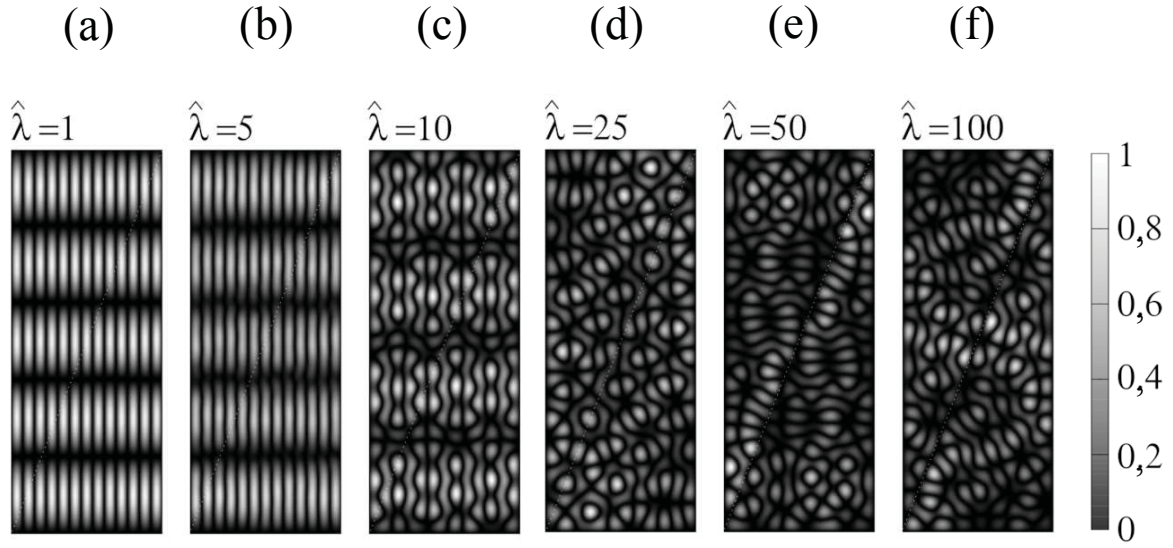


Figura 4.10: Gráficos das densidades de probabilidade $|\Psi(x_1, x_2)|^2$ normalizadas, via MCP, para um bilhar retangular com uma parede permeável em $x_2 = \frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}-1}x_1$. Para o par de números quânticos $(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = (13, 5)$, ilustramos $|\Psi(x_1, x_2)|^2$ em função dos valores de $\hat{\lambda}$, em que $\hat{\lambda} = 2\tilde{\lambda}$: predomina-se o perfil de autoestados de um bilhar retangular para valores baixos de $\hat{\lambda}$, (a) e (b), passando por um perfil de mistura de autoestados de um retângulo e de um triângulo, (c) e (d), até o predomínio de autoestados de bilhares triangulares, (e) e (f). A linha pontilhada branca não é gerada pelo solução numérica do problema, sendo apenas uma referência visual para a parede permeável. Esta figura é uma contribuição do Prof. Dr. Fábio M. Zanetti.

A Fig. 4.10 mostra os gráficos das densidades de probabilidade $|\Psi(x_1, x_2)|^2$ geradas numericamente por MCP para valores crescentes da intensidade $\hat{\lambda}$. Pelos motivos semelhantes às funções de onda para $\gamma = 3$, observa-se o predomínio de autoestados de um bilhar retangular para valores relativamente baixos de $\hat{\lambda}$, Figs. 4.10(a) e (b); aumentando-se $\hat{\lambda}$, a permeabilidade da parede diminui, mudando a morfologia da função de onda. Observe que a Fig. 4.10(c) mostra, em sua morfologia, a presença de autoestados do bilhar retangular, mas de maneira granulada. Já as Figs. 4.10(d)-(f), não se reconhece mais os autoestados do retângulo, mas sim de dois triângulos retângulos progressivamente.

Neste capítulo, mostramos que soluções do tipo *Ansatz* de Bethe não são possíveis para $\gamma \neq 1$, pois os coeficientes “A” e “B” das Eqs. (4.34) e (4.36) são satisfeitas simultaneamente apenas quando $\gamma = 1$. Esse problema pode ser visto pela dificuldade de satisfazer as condições **CI** e **CII** juntas.

Difração, *Genus* e Bilhares com Paredes Permeáveis

Neste capítulo, demonstramos que o espalhamento em uma cunha será não difrativa apenas quando o denominador do ângulo de abertura da cunha for igual a um. Esse resultado já é conhecido na literatura: quantitativamente, ele é obtido da teoria de difração por ondas eletromagnéticas [144, 188], mas é complicada e indireta; e, qualitativamente, é obtido no contexto de espalhamento quântico [24, 189]. A nossa demonstração é mais simples e direta. Apresentamos também uma simplificação da Eq. (2.4) para o cálculo do *genus* de bilhares triângulo retângulo racionais e as consequentes relações com o número de estados N_{es} e o denominador do ângulo θ , associados ao nosso sistema de duas partículas em uma caixa 1D.

Essas análises são importantes para a proposta do seguinte modelo: um bilhar retangular com parede permeável corresponde ao espalhamento de uma partícula no toro por uma barreira permeável, com o qual determinamos o *genus* do sistema, um resultado inédito. Esse modelo complementa a explicação do Capítulo 4 sobre a não aplicabilidade do *Ansatz* de Bethe para o sistema discutido nesta tese.

Concluimos este capítulo discutindo brevemente a não integrabilidade do bilhar pipa, que é um contra-exemplo de um sistema com simetria de reflexão que não admite uma função de onda do tipo *Ansatz* de Bethe, e apresentamos os resultados numéricos de estatística de níveis de energia vizinhos que corroboram, ao menos qualitativamente, o modelo proposto.

5.1 Ausência de Difração em Cunhas com Ângulo de Abertura $\frac{\pi}{n_1}$

Analiseemos aqui as condições sobre o ângulo de abertura \hat{a} de uma cunha para que uma trajetória incidente em um de seus lados seja refletida, por fim, na mesma direção inicial daquela de incidência (veja as Figs. 5.1(d) e (e)). Caso isso não ocorra, a trajetória refletida sairá em uma direção diferente da inicial (veja a Fig. 5.1(f)), isto é, temos uma **divergência de trajetórias**. Então, irá difratar qualquer onda que possua o mesmo número de onda que siga a mesma trajetória. Por causa desse vínculo, por abuso de linguagem, nos referimos como “difração” de trajetórias. Em vista disso, quando mencionarmos difração, sem as aspas, estará implícito essa conexão entre trajetória e propagação de uma onda.

Considere uma cunha com um ângulo de abertura \hat{a} e vértice V (veja a Fig. 5.1(a)). Incidamos uma trajetória no ponto A paralela à bissetriz da cunha. Consequentemente, o ângulo de incidência é $\hat{a}_1 = \frac{\hat{a}}{2}$. Assumindo a ocorrência de reflexões especulares, a trajetória é refletida com o mesmo ângulo \hat{a}_1 para o outro lado da cunha em um ponto B. Isso define um triângulo $\triangle ABV$. Agora, precisamos determinar qual é o ângulo de incidência em B, o ângulo interno $\hat{b}_i = \pi - 3\frac{\hat{a}}{2}$ ou o externo $\hat{b}_e = 3\frac{\hat{a}}{2}$ no $\triangle ABV$. Tomemos o ângulo \hat{b}_e como referência. Há três casos possíveis:

(i) Para $\hat{b}_e < \frac{\pi}{2}$, o ângulo de incidência é $\hat{a}_2 = \hat{b}_e$, em que $\hat{a}_2 = \hat{a} + \hat{a}_1 = 3\frac{\hat{a}}{2}$. Desse modo, a trajetória refletida aproxima-se do vértice da cunha.

(ii) Para $\hat{b}_e = \frac{\pi}{2}$, o ângulo de incidência é $\hat{a}_2 = \hat{b}_e$. Isso significa que a trajetória refletida será sobreposta a incidente; por conseguinte, a trajetória de saída é paralela a de entrada (veja a indicação em azul na Fig. 5.1(e)).

(iii) Para $\hat{b}_e > \frac{\pi}{2}$, o ângulo de incidência é $\hat{a}_2 = \hat{b}_i$, em que $\hat{a}_2 = \pi - 3\frac{\hat{a}}{2}$; assim, a trajetória se afasta do vértice da cunha (veja a Fig. 5.1(c) e (d)).

No caso (i), é possível que ocorram outras colisões com as paredes da cunha. Por exemplo, a trajetória que parte de B atingirá o outro lado da cunha em um ponto C (veja a Fig. 5.1(b)). Novamente, isso define um triângulo $\triangle BCV$, com ângulo interno $\hat{c}_i = \pi - 5\frac{\hat{a}}{2}$ e externo $\hat{c}_e = 5\frac{\hat{a}}{2}$. Como antes, é preciso verificar quais desses ângulos será o ângulo de incidência. Supomos que ocorram ℓ colisões, em que o ângulo de incidência é

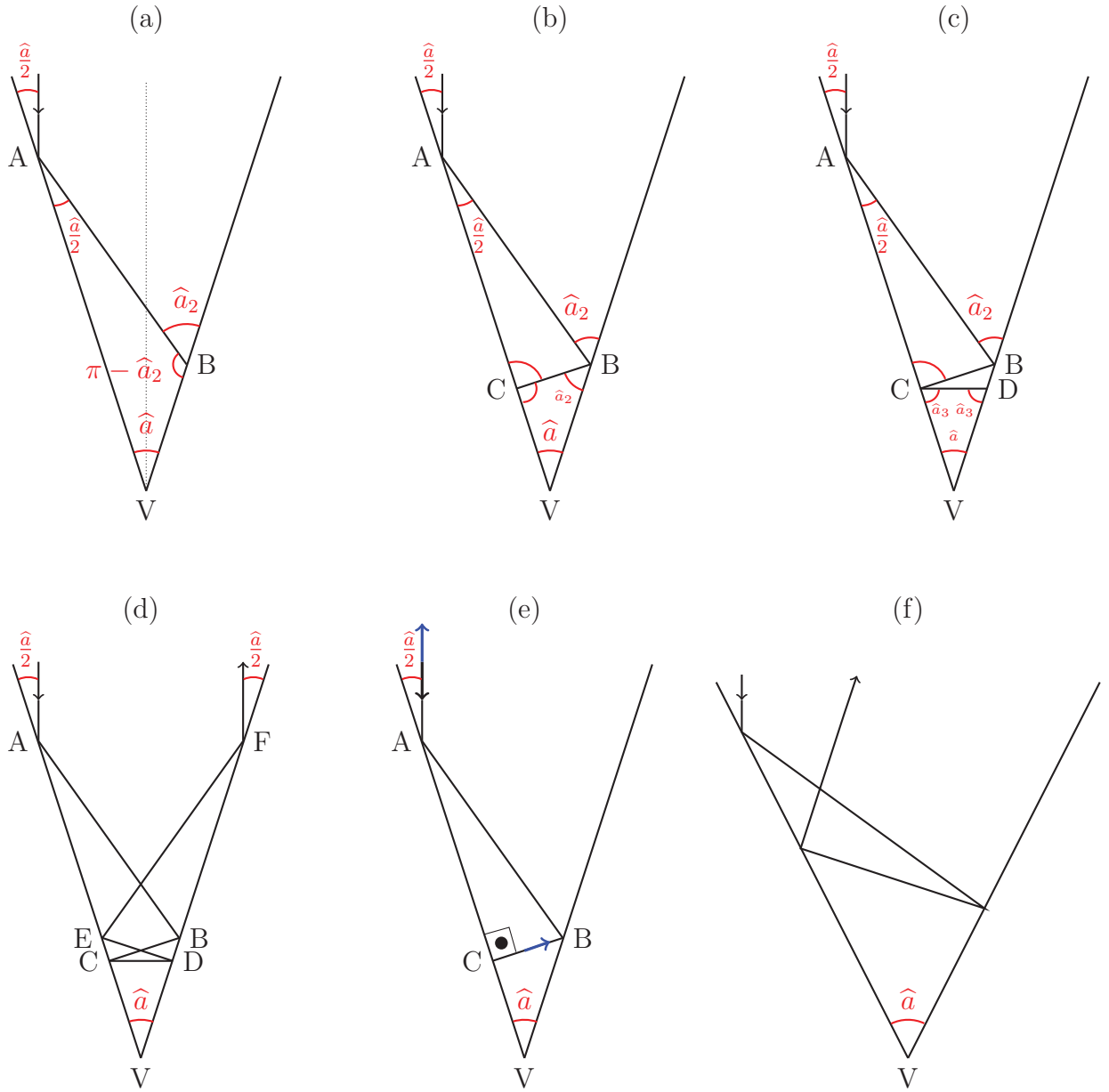


Figura 5.1: Algumas situações específicas envolvendo incidência e reflexão de trajetórias em cunhas de ângulo de abertura \hat{a} para o caso $m_1 = 1$, exceto o item (f). (a) A incidência de uma trajetória paralela à bissetriz de uma cunha em um ponto A se dá por um ângulo $\frac{\hat{a}}{2}$. Essa trajetória é refletida especularmente em direção a um ponto B do outro lado da cunha, originando $\triangle ABV$. (b) O ângulo \hat{a}_2 é inferior a $\frac{\pi}{2}$; por isso, a trajetória refletida incide em um ponto C, aproximando-se do vértice V e originando o $\triangle CBV$. (c) Para um n_1 par, a trajetória refletida de C para D origina um $\triangle CDV$ isósceles; consequentemente, a trajetória não se aproxima mais de V. (d) Em seguida, a trajetória é refletida em E e em F, afastando-se do vértice V em uma trajetória simétrica em relação à bissetriz da cunha. (e) Para um valor particular de n_1 ímpar, se uma trajetória saindo de B incidir perpendicularmente em C, a trajetória refletida vai se sobrepor à trajetória durante a aproximação de V. Para valores gerais de n_1 , ocorrem várias reflexões das trajetórias no interior da cunha até resultar em algumas das situações semelhantes mostradas aqui. (f) Exemplo de divergência de trajetória em uma cunha contendo um ângulo de abertura $\hat{a} = \frac{3\pi}{10} = 54^\circ$.

o ângulo externo. O resultado desse processo iterativo são ângulos de incidência

$$\hat{a}_\ell = (2\ell - 1)\frac{\hat{a}}{2}, \quad (5.1)$$

pois corresponde ao ângulo externo do triângulo formado pelos lados da cunha e a última trajetória refletida. Por ser uma função crescente, em cada colisão, o ângulo de incidência aproxima-se de $\frac{\pi}{2}$. Se esse ângulo de incidência se igualar a $\frac{\pi}{2}$, estaremos no caso (ii), e se for maior que $\frac{\pi}{2}$, estaremos no caso (iii). Portanto, $\hat{a}_\ell \leq \frac{\pi}{2}$.

Definindo $\ell = \ell_0$ como sendo o maior inteiro em que $\hat{a}_\ell \leq \frac{\pi}{2}$, o próximo ângulo incidente \hat{a}_{ℓ_0+1} é aquele que muda o sentido da trajetória. Assim, de acordo com (iii),

$$\hat{a}_{\ell_0+1} = \pi - \hat{a} - \hat{a}_{\ell_0} \Rightarrow \hat{a}_{\ell_0+1} = \pi - (2\ell_0 + 1)\frac{\hat{a}}{2},$$

e os ângulos de incidência seguintes são

$$\hat{a}_{\ell_0+l} = \pi - \hat{a} - (\pi - \hat{a}_{\ell_0+l-1}) \Rightarrow \hat{a}_{\ell_0+l} = \pi - [2(\ell_0 + l) + 1]\frac{\hat{a}}{2}, \quad l > 1.$$

Para que o último ângulo de incidência coincida com a primeira, devemos ter $-\hat{a}_1 = \hat{a}_{\ell_0+l}$. Consequentemente,

$$\ell'\hat{a} = \pi,$$

com $\ell' = \ell_0 + l$ inteiro positivo. Para $\frac{\hat{a}}{\pi} = \frac{m_1}{n_1}$ um racional com m_1 e n_1 coprimos, temos

$$\ell' = \frac{n_1}{m_1},$$

que é inteiro se, e somente se, $m_1 = 1$.

Portanto, o ângulo de abertura da cunha para que não haja “difração” de trajetórias é

$$\hat{a} = \frac{\pi}{n_1}. \quad (5.2)$$

Pela Eq. (5.2), são necessárias n_1 colisões com as paredes da cunha desde a entrada até a saída paralela da trajetória. Além disso, o comportamento da trajetória se distingue conforme n_1 for ímpar ou par.

- n_1 ímpar: substituindo a Eq. (5.2) na Eq. (5.1), obtemos

$$\hat{a}_\ell = (2\ell - 1)\frac{\pi}{2n_1}.$$

Como o denominador é ímpar, para algum valor de ℓ , temos $\widehat{a}_\ell = \frac{\pi}{2}$. De fato, basta considerarmos $\ell = \frac{n_1+1}{2}$. Isso significa que, para qualquer valor de n_1 ímpar, temos a ocorrência do caso (ii) (veja a Fig. 5.1(e)).

• n_1 par: nesse caso, $\frac{n_1+1}{2}$ não é inteiro, o que significa que não há reflexão de 90° pela trajetória (veja a Fig. 5.1(c)). Sabendo que o número necessário de colisões para uma saída paralela em relação à trajetória de entrada é n_1 , há $\ell = \frac{n_1}{2}$ colisões até a inversão do sentido da trajetória (veja a Fig. 5.1(d)). Então, o último ângulo incidente que se aproxima do vértice V é

$$\widehat{a}_{\frac{n_1}{2}} = (n_1 - 1) \frac{\pi}{2n_1},$$

e o primeiro ângulo de incidência com trajetória invertida é

$$\widehat{a}_{\frac{n_1}{2}+1} = \pi - \widehat{a} - \widehat{a}_{\frac{n_1}{2}} \Rightarrow \widehat{a}_{\frac{n_1}{2}+1} = (n_1 - 1) \frac{\pi}{2n_1}.$$

Logo,

$$\widehat{a}_{\frac{n_1}{2}} = \widehat{a}_{\frac{n_1}{2}+1},$$

ou seja, há um triângulo isósceles na região de inversão do sentido da trajetória.

Uma outra maneira para se obter a Eq. (5.2) é pelo ângulo subentendido entre a trajetória incidente e a refletida subsequentes,

$$\theta_\ell = \pi - (2\ell - 1)\widehat{a}.$$

Os ângulos de abertura θ_ℓ diminuem, aproximando-se de zero até a inversão do sentido da trajetória. Em seguida, o módulo dos ângulos de abertura θ'_ℓ aumentam novamente em cada colisão, de tal maneira que $\theta'_\ell = -\theta_\ell$. Então, o ângulo de abertura \widehat{a} da cunha tal que $\theta'_{\ell'} = -\pi + \widehat{a}$ e $\theta'_{\ell'} = \pi - \widehat{a} = \theta_1$ é

$$\widehat{a} = \frac{\pi}{\ell'} \Rightarrow \ell' = \frac{n_1}{m_1},$$

para que a trajetória de saída seja paralela a de entrada. Como ℓ' deve ser um inteiro, temos que $m_1 = 1$.

Portanto, mostramos aqui uma maneira alternativa simples que justifica a ausência de difração para ângulos com numeradores iguais a um, conforme mencionado no Capítulo 2 a respeito do espalhamento de ondas eletromagnéticas e de funções de onda.

No caso de $m_1 > 1$, não vale mais a igualdade $\theta'_\ell = -\theta_\ell$, o que significa que a trajetória

de saída não será mais paralela a de entrada, ou seja, temos a ocorrência de difração pela cunha, como ilustrada na Fig. 5.1(f).

Com relação ao espalhamento de funções de onda, C. Jung estudou o problema quântico de três partículas interagindo por um potencial degrau [190], em vez de um potencial delta de Dirac, e demonstrou a sua equivalência com o problema de um bilhar triangular. Para partículas de massas iguais, o bilhar triangular torna-se um triângulo equilátero, com ângulos internos $\frac{\pi}{3}$ e, portanto, sem apresentar difração. A função de onda do problema, então, pôde ser obtida através da identificação dos grupos de simetria desse triângulo. Variando-se uma das massas das partículas, muda-se um dos ângulos internos desse bilhar. Para uma mudança arbitrária, o ângulo interno correspondente terá numerador maior do que 1, manifestando espalhamento difrativo, e as funções de onda não são mais passíveis de uma representação por funções elementares. As soluções integráveis são obtidas apenas quando se faz a massa de uma das três partículas infinita e, para as outras duas partículas, ou se iguala suas massas, gerando o bilhar triângulo retângulo isósceles (o nosso caso $\gamma = 1$), ou torna a relação entre as duas massas igual a três, gerando o bilhar triângulo hemiequilátero (o nosso caso $\gamma = 3$). Essa é uma maneira alternativa encontrada na literatura para estudar um sistema semelhante ao tratado aqui.

5.2 O *Genus* para Bilhares Triângulo Retângulo

No Capítulo 2, apresentamos a Eq. (2.4) para o cálculo do *genus* de um bilhar poligonal racional a partir dos valores dos seus ângulos internos,

$$g(\mathcal{S}) = 1 + \frac{\mathcal{N}}{2} \sum_{i=1}^h \frac{m_i - 1}{n_i}, \quad \mathcal{N} = \text{mmc}(n_1, \dots, n_h),$$

e prever a integrabilidade do bilhar poligonal sem a necessidade de recorrer ao *unfolding*, que poderá ser impraticável para alguns polígonos.

No caso de bilhares triângulo retângulo, apesar do cálculo não oferecer dificuldades, procuramos uma maneira de reduzir o máximo possível essa tarefa e, ao mesmo tempo, tentar obter alguma informação fisicamente importante.

Considere um triângulo retângulo racional, com ângulos internos divididos por π ,

$$\frac{\hat{a}}{\pi} = \frac{m_1}{n_1} = \frac{1}{2}, \quad \frac{\hat{b}}{\pi} = \frac{m_2}{n_2}, \quad \frac{\hat{c}}{\pi} = \frac{m_3}{n_3},$$

em que $\frac{m_i}{n_i}$ são frações irredutíveis. Substituindo na Eq. (2.4), temos

$$g(\mathcal{S}) = 1 + \frac{\text{mmc}(2, n_2, n_3)}{2} \left(\frac{m_2 - 1}{n_2} + \frac{m_3 - 1}{n_3} \right). \quad (5.3)$$

O objetivo aqui é escrever $g(\mathcal{S})$ apenas em função de uma dessas quantidades racionais. A complementariedade dos ângulos \widehat{b} e \widehat{c} permite expressar o racional $\frac{m_3}{n_3}$ em função do racional $\frac{m_2}{n_2}$,

$$\frac{m_3}{n_3} = \frac{n_2 - 2m_2}{2n_2}.$$

Em geral, o lado direito não é uma fração irredutível; para garantir a irredutibilidade, dividimos o numerador e o denominador por $\text{mdc}(n_2 - 2m_2, 2n_2)$, dando

$$g(\mathcal{S}) = 1 + \frac{\text{mmc}(2, n_2, n_3)}{4n_2} [n_2 - 2 - \text{mdc}(n_2 - 2m_2, 2n_2)]. \quad (5.4)$$

Os resultados da Teoria dos Números [191]

$$\text{mdc}(a, b) = \text{mdc}\left(\frac{a}{2}, b\right),$$

para a par e b ímpar, e

$$\text{mdc}(p.a, p.b) = p.\text{mdc}(a, b), \quad p > 0 \text{ inteiro},$$

aplicados na Eq. (5.4), geram os seguintes casos para cada k inteiro:

1. $n_2 = 4k$ e m_2 ímpar: $g(\mathcal{S}) = k$;
2. $n_2 = 4k + 2$ e m_2 ímpar: $g(\mathcal{S}) = k$;
3. $n_2 = 4k + 1$ e m_2 par ou ímpar: $g(\mathcal{S}) = 2k$;
4. $n_2 = 4k + 3$ e m_2 par ou ímpar: $g(\mathcal{S}) = 2k + 1$.

Como o inteiro k está relacionado ao denominador n_2 do ângulo \widehat{b} , o *genus* $g(\mathcal{S})$ depende apenas do numerador de um dos ângulos internos do triângulo retângulo racional,

$$g(\mathcal{S}) = \begin{cases} \frac{n_2}{4}, & n_2 = 4k \\ \frac{n_2-1}{2}, & n_2 = 4k + 1 \quad \text{ou} \quad n_2 = 4k + 3 \\ \frac{n_2-2}{4}, & n_2 = 4k + 2 \end{cases}. \quad (5.5)$$

Dessa forma, para determinar o *genus* de um bilhar triângulo retângulo, procedemos

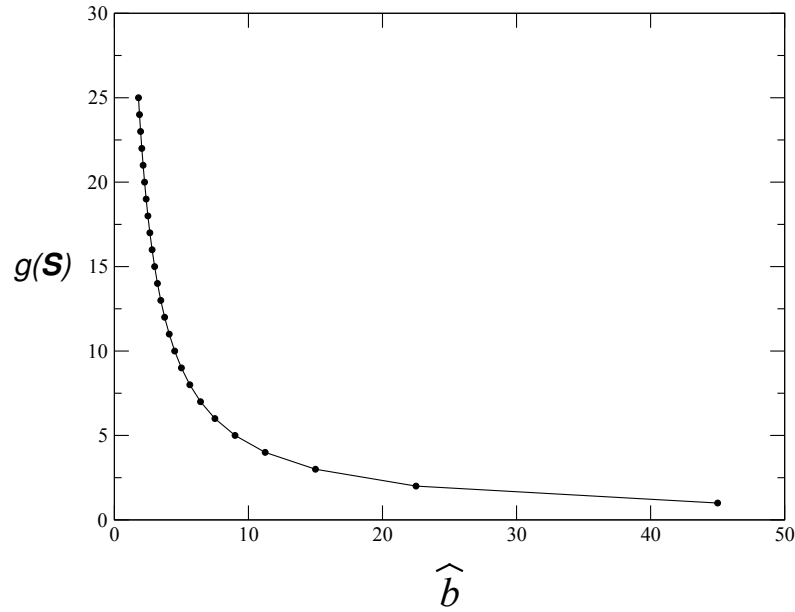


Figura 5.2: *Genus* em função do ângulo \hat{b} para denominadores múltiplos inteiros de 4: observa-se que o valor do *genus* $g(\mathcal{S})$ diminui (aumenta), à medida que o ângulo \hat{b} aumenta (diminui).

da seguinte maneira:

- (i) Escolha um dos ângulos agudos do bilhar;
- (ii) Se o ângulo estiver em grau, divida-o por 180 para obter a sua forma racional irredutível;
- (iii) Identifique o denominador em um dos três casos da Eq. (5.5).

Para **cada uma das três categorias**, a Eq. (5.5) mostra que o *genus* é uma função crescente em relação ao denominador n_2 , ou seja, quanto menor for um dos ângulos agudos do bilhar triângulo retângulo, maior será o valor do seu *genus*. Exemplifiquemos isso para o denominador $n_2 = 4k$; fixando $m_2 = 1$, o aumento (a diminuição) de n_2 implica na diminuição (aumento) do ângulo \hat{b} ; de fato, expressando esse ângulo em graus, temos $\hat{b} = \frac{180^\circ}{n_2}$. Consequentemente, o *genus* em função de \hat{b} para esse caso particular será

$$g(\mathcal{S}) = \frac{45^\circ}{\hat{b}}, \quad (5.6)$$

cuja representação gráfica está na Fig. 5.2. É claro que, pela complementaridade dos ângulos, a diminuição do ângulo \hat{b} implica no aumento do ângulo complementar \hat{c} e, nesse caso, não será observado o decaimento mostrado na Fig. 5.2, mas uma curva crescente.

Outra consequência interessante da Eq. (5.5) é que uma pequena variação de um dos ângulos agudos ocasiona uma grande variação do *genus*. Uma implicação direta disso é a fácil transição de um bilhar integrável para um pseudointegrável. Por exemplo, o bilhar

triângulo retângulo isósceles tem ângulos agudos iguais 45° ou $\frac{\pi}{4}$, e tem *genus* igual a um; se variássemos um dos ângulos por 1 milésimo, mas mantendo o bilhar como triângulo retângulo, os ângulos agudos passam a ser iguais a $44,999^\circ$ e $45,001^\circ$. Pelo procedimento acima, encontramos a fração irredutível $\frac{45001}{180000}$. Então, $n_2 = 180000$, que é um múltiplo de 4 e, pela Eq. (5.5), o *genus* é 45000, ou seja, para uma pequena variação do ângulo, a dinâmica clássica passa de um único toro para 45 mil toros!

A independência da Eq. (5.5) do numerador m_2 significa que há um conjunto finito de bilhares triângulo retângulo diferentes com o mesmo valor de *genus*. Esse é o caso, por exemplo, de $n_2 = 7$: após o cálculo dos ângulos complementares, o conjunto de ângulos agudos possíveis, são:

$$\left\{ \frac{\pi}{7}, \frac{2\pi}{7}, \frac{3\pi}{7} \right\},$$

ou seja, o inteiro m_2 assume os valores 1, 2 e 3. Logo, há três bilhares triângulo retângulo, com ângulos agudos

$$\left\{ \frac{\pi}{7}, \frac{5\pi}{14} \right\}, \left\{ \frac{2\pi}{7}, \frac{3\pi}{14} \right\}, \left\{ \frac{3\pi}{7}, \frac{\pi}{14} \right\},$$

com *genus* igual a 3. Há bilhares triângulo retângulo com denominadores diferentes possuindo o mesmo *genus*. Um exemplo é o bilhar com ângulo agudo $\frac{\pi}{12}$, cujo *genus* também é 3. Note que o seu ângulo complementar é $\frac{5\pi}{12}$. Assim, ao contrário do que aconteceu para $n_2 = 7$, o ângulo complementar pertence ao conjunto de ângulos agudos possíveis. Isso sempre acontece quando n_2 não for um número primo. Em vista disso, podemos estimar o número de bilhares triângulo retângulo com o mesmo *genus*. Lembrando que

$$0 < \hat{b} < \frac{\pi}{2},$$

segue-se que

$$m_2 < \frac{n_2}{2},$$

ou seja, o número máximo de bilhares com o mesmo *genus* é inferior a metade do denominador.

5.3 Número de Estados Clássicos em Função do *Genus*

Na seção anterior, obtemos uma conexão direta entre o *genus* e o denominador de um dos ângulos agudos do bilhar triângulo retângulo. Esse ângulo é justamente a metade do

ângulo $\theta = \frac{m\pi}{n}$ associado à razão de massas γ , Eq. (3.9). Como o número de estados possíveis gerados em uma sucessão de colisões p-p e p-w é $N_{es} = 4n$ (Capítulo 3), então podemos também associá-lo ao valor do *genus*.

Considere o ângulo $\theta = \frac{m\pi}{n}$ e o ângulo agudo $\hat{b} = \frac{m_2\pi}{n_2}$ do bilhar,

$$\frac{m}{n} = 2 \frac{m_2}{n_2}. \quad (5.7)$$

e as propriedades [191]

1. $\text{mdc}(a, b) = \text{mdc}\left(\frac{a}{2}, b\right)$, para quaisquer inteiros a e b .
2. Para duas frações irredutíveis quaisquer $\frac{a}{b}$ e $\frac{c}{d}$, temos $\frac{a}{b} = \frac{c}{d}$ se, e somente se, $a = c$ e $b = d$.

Pela Eq. (5.5), há três possibilidades para a Eq. (5.7):

- $n_2 = 4k$.

Neste caso, pela Eq. (5.7), temos

$$\frac{m}{n} = \frac{m_2}{2k}. \quad (5.8)$$

Como $\text{mdc}(m_2, n_2) = 1 = \text{mdc}(m_2, 4k)$, segue-se que m_2 é um inteiro ímpar diferente de $4k$. Pela propriedade 1, temos que $\text{mdc}(m_2, 4k) = 1 = \text{mdc}(m_2, 2k)$, ou seja, a fração $\frac{m_2}{2k}$ ainda é irredutível. Pela propriedade 2, concluímos que $m = m_2$ e $n = 2k = \frac{n_2}{2}$.

Desse modo, como o número de estados $N_{es} = 4n$, pela Eq. (5.5), obtemos $N_{es} = 8g(\mathcal{S})$.

- $n_2 = 4k + 1$ ou $n_2 = 4k + 3$.

Considere $n_2 = 4k + 1$. Como $\text{mdc}(m_2, n_2) = 1 = \text{mdc}(m_2, 4k + 1)$, o inteiro m_2 ou é par, ou é um inteiro ímpar diferente de $4k + 1$. Assim,

$$\frac{m}{n} = 2 \frac{m_2}{4k + 1}. \quad (5.9)$$

Pela propriedade 1, temos $\text{mdc}(2m_2, 4k + 1) = 1 = \text{mdc}(m_2, 4k + 1)$, ou seja, a fração $2 \frac{m_2}{4k + 1}$ permanece irredutível; então, pela propriedade 2, temos $m = 2m_2$ e $n = 4k + 1$.

Como $n_2 = 4k + 1$, segue-se que $n = n_2$, de modo que $n = 2g(\mathcal{S}) + 1$, de acordo com a Eq. (5.5). Portanto, sendo $N_{es} = 4n$, temos $N_{es} = 4(2g(\mathcal{S}) + 1)$.

O mesmo resultado é obtido para $n_2 = 4k + 3$.

- $n_2 = 4k + 2$

Pela Eq. (5.7), temos

$$\frac{m}{n} = \frac{m_2}{2k+1}. \quad (5.10)$$

Como $\text{mdc}(m_2, n_2) = 1 = \text{mdc}(m_2, 4k+2) = \text{mdc}(m_2, 2k+1)$ (propriedade 1), a fração $\frac{m_2}{2k+1}$ permanece irredutível, em que $m_2 \neq 2k+1$. Assim, pela propriedade 2, temos $m = m_2$ e $n = 2k+1 = \frac{n_2}{2}$.

Pela Eq. (5.5), segue-se que $n = 2g(\mathcal{S}) + 1$, e o número de estados é $N_{es} = 4(2g(\mathcal{S}) + 1)$.

Portanto, o número de estados em função do *genus* é

$$N_{es} = \begin{cases} 8g(\mathcal{S}), & n \text{ par} \\ 4(2g(\mathcal{S}) + 1), & n \text{ ímpar} \end{cases}, \quad (5.11)$$

ou seja, para cada valor do *genus*, há sempre dois números de estados diferentes (veja a Fig. 5.3). A Eq. (5.11) pode ser escrito como

$$N_{es} = 8g(\mathcal{S}) + 2(1 - (-1)^n). \quad (5.12)$$

Ainda assim, é uma função monótona crescente¹, como se observa na Fig. 5.3. Como em cada um desses casos, N_{es} é uma função afim², então é monótona também. Isso não é suficiente para a Eq. (5.12) ser monótona. Considere dois valores diferentes de *genus*, $g_{\text{par}}(\mathcal{S})$ para n_{par} par e $g_{\text{ímpar}}(\mathcal{S})$ para $n_{\text{ímpar}}$ ímpar. Não é possível haver o mesmo número de estados, pois isto implicaria que $g_{\text{par}}(\mathcal{S}) - g_{\text{ímpar}}(\mathcal{S}) = \frac{1}{2}$, que é uma contradição, pois o *genus* é sempre inteiro. Também não é possível se ter $N_{es(\text{par})} > N_{es(\text{ímpar})}$, quando $g_{\text{par}}(\mathcal{S}) < g_{\text{ímpar}}(\mathcal{S})$, pois isto nos leva a $4 < N_{es(\text{ímpar})} - N_{es(\text{par})}$, ou seja, $N_{es(\text{par})} < N_{es(\text{ímpar})}$. A Fig. 5.3 ilustra a monotocidade da Eq. (5.12).

Substituindo, agora, o número de estados $N_{es} = 4n$ nas Eqs. (5.11) e (5.12), obtemos o *genus* em função de n ,

$$g(\mathcal{S}) = \begin{cases} \frac{n}{2}, & n \text{ par} \\ \frac{n-1}{2}, & n \text{ ímpar} \end{cases} \quad (5.13)$$

e

$$g(\mathcal{S}) = \frac{n}{2} - \frac{1 - (-1)^n}{4}, \quad (5.14)$$

respectivamente. O gráfico em azul da Fig. 5.4 mostra também que há sempre dois valores

¹Uma função monótona crescente é aquela na qual $\tilde{x} < \tilde{y} \Rightarrow F(\tilde{x}) < F(\tilde{y})$ para qualquer \tilde{x} e \tilde{y} reais [192].

²Uma função é afim se for da forma $F(\tilde{x}) = a\tilde{x} + b$ [193].

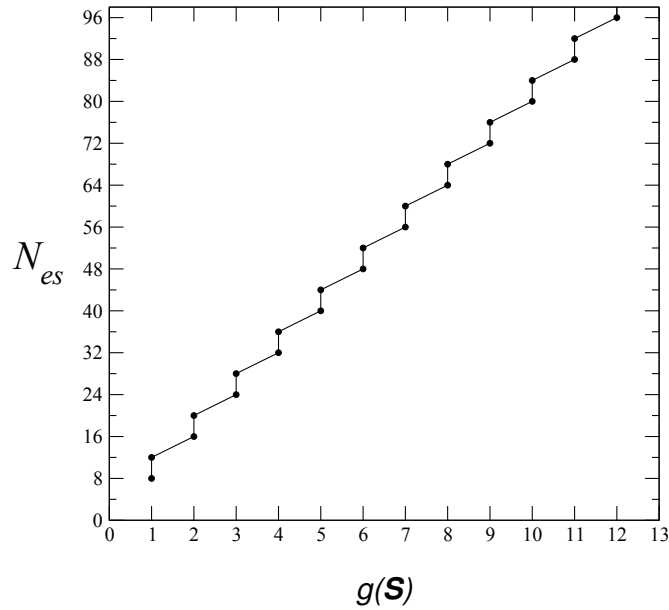


Figura 5.3: Número de estados N_{es} em função do *genus* $g(\mathcal{S})$ é uma função monótona crescente.

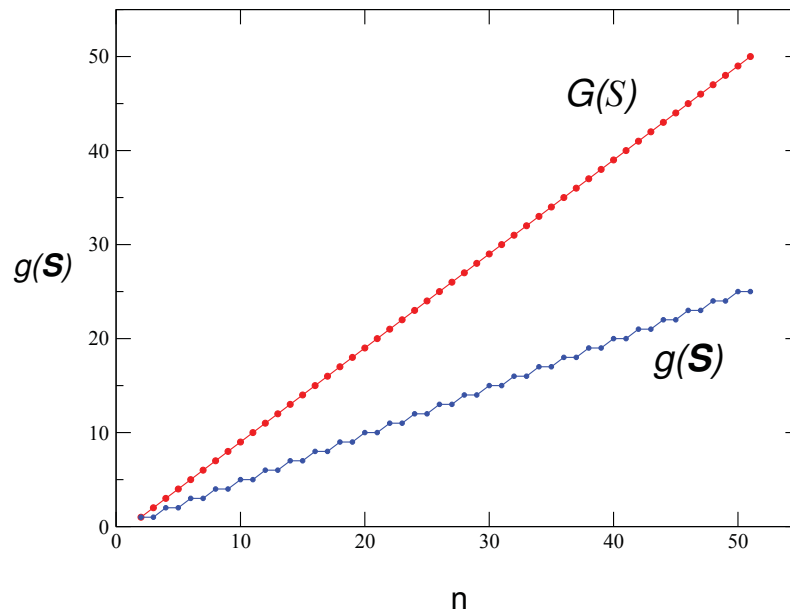


Figura 5.4: Em azul: O $g(\mathcal{S})$ em função do denominador n do ângulo $\theta = \frac{m\pi}{n}$ apresenta patamares de dois inteiros consecutivos, o que significa que há, pelo menos, dois bilhares triângulo retângulo com o mesmo valor de *genus* (não se está considerando aqui a família de bilhares com o mesmo *genus* determinado pelo numerador m_2 e, por conseguinte, pelo numerador m). Em vermelho: O $G(\mathcal{S})$ em função do denominador n não apresenta patamares, ou seja, bilhares retangulares com parede permeável diferentes sempre terão valores de *genus* diferentes (a menos da família de bilhares definida pelo numerador m). Além disso, exceto o caso $n = 2$, temos $G(\mathcal{S}) > g(\mathcal{S})$.

distintos de n para o mesmo valor do $g(\mathcal{S})$, como acontece, por exemplo, para os bilhares integráveis triângulo retângulo isósceles ($n = 2$) e o triângulo hemiequilátero ($n = 3$).

5.4 Uma Proposta para o Cálculo do *Genus* para Bilhares com Paredes Permeáveis

No Capítulo 4, desenvolvemos um método semiclássico que mostrou que o sistema de duas partículas de razão de massas $\gamma = 3$, que é classicamente integrável, não satisfaz as condições de contorno quando a intensidade do potencial de interação é finita, inviabilizando uma solução do tipo *Ansatz* de Bethe. Mas isso não é suficiente para concluirmos se $\gamma = 3$ tornou-se quanticamente não integrável. A princípio, como todos os ângulos internos do bilhar retangular tem numerador igual a um, ou seja, $\frac{\pi}{2}$, $\frac{\pi}{3}$ e $\frac{\pi}{6}$, não há espalhamento difrativo. No entanto, notamos que paredes permeáveis em bilhares quânticos funcionam como uma barreira e, de acordo com a subseção 2.1.3, elevam o *genus* do sistema, como Richens e Berry observaram no bilhar quadrado periódico com uma barreira quadrada em seu interior. Assim, propomos aqui uma possível forma de definir *genus* para bilhares com uma parede permeável. A vantagem dessa proposta é possibilitar uma explicação semiclássica, devido ao seu vínculo com a ideia de trajetórias clássicas, para a não aplicabilidade do *Ansatz* de Bethe quando as partículas têm massas diferentes.

5.4.1 O *Genus* de Bilhares Retangulares com Parede Permeável

Considere um bilhar retangular possuindo uma parede permeável em sua diagonal e tendo $\frac{\theta}{2}$ como um dos ângulos internos (veja a Fig. 5.5(a)). Aplicando o método de *unfolding*, obtemos uma superfície invariante gerando uma representação planar de um toro com uma barreira, como pode-se ver nas Figs. 5.5(b) e 5.5(c), as quais são equivalentes, pois distinguem-se apenas por uma translação de coordenadas.

A Fig. 5.5(b) mostra uma partícula refletida na diagonal (parede permeável) em dois instantes, que nada mais é do que o espalhamento de uma partícula por um obstáculo de ângulo θ , situação análoga ao de Richens e Berry mencionada anteriormente. Conforme for o valor de θ , o espalhamento é difrativo ou não, como demonstrado na seção 5.1 e em [137, 194]. Dessa forma, se o bilhar retangular for um quadrado, temos que $\frac{\theta}{2} = \frac{\pi}{4} = \frac{\rho}{2}$, dando $\theta = \frac{\pi}{2} = \rho$, ou seja, os numeradores dos ângulos são iguais a um, e o espalhamento é não difrativo em qualquer uma das situações das Figs. 5.5(b) ou (c). Então, o valor do *genus* é igual a um, como já sabido pelo fato de ser um sistema quanticamente integrável.

A situação muda se $\frac{\theta}{2} = \frac{\pi}{3}$, pois $\theta = \frac{2\pi}{3}$, ou seja, o numerador é maior que um e o espalhamento da Fig. 5.5(b) é difrativo. Como o obstáculo no toro tem uma forma de losango (veja a Fig. 5.5(c)), com dois ângulos $\theta = \frac{2\pi}{3}$ e dois ângulos $\rho = \frac{\pi}{3}$, o *genus* corres-

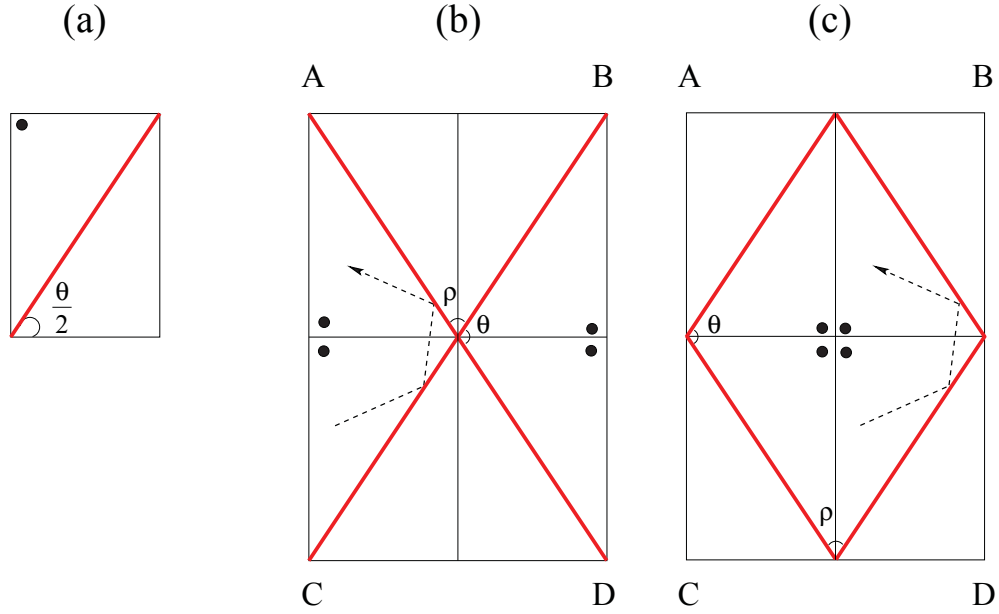


Figura 5.5: (a) Bilhar retangular com uma parede permeável, em que $\frac{\theta}{2}$ é um dos seus ângulos internos. O círculo no topo é uma referência visual. (b) Superfície invariante S gerado pelo método de *unfolding*. O ângulo ρ é o suplementar do ângulo θ , $\rho = \pi - \theta$. (c) Superfície invariante S gerado pelo método de *unfolding* equivalente ao do item (b), distinguindo-se por uma translação em dos seus lados. A linha pontilhada orientada é uma trajetória de uma partícula incidindo na parede permeável. Os lados \overline{AB} e \overline{CD} , assim como os lados \overline{AC} e \overline{BD} , são identificados como sendo os mesmos. Assim, essas superfícies invariantes são representações planares de toros.

pondente é dois. Esse resultado é interessante, pois a presença da parede permeável torna o bilhar triângulo hemiequilátero, que tem *genus* igual a um, em um bilhar retangular pseudointegrável.

Outra situação interessante é a do bilhar retangular com $\frac{\theta}{2} = \frac{3\pi}{8}$ ou $67,5^\circ$ ($\gamma = \frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}-1}$), dando um *genus* igual a dois. Esse caso também corresponde a um espalhamento difrativo, pois o numerador do ângulo θ é maior que um, embora a do ângulo ρ seja igual a um (é uma situação semelhante ao caso $\theta = \frac{2\pi}{3}$). Assim, o obstáculo em forma de losango com dois ângulos $\theta = \frac{3\pi}{4}$ e dois ângulos $\rho = \frac{\pi}{4}$, conduz a um *genus* igual a três, e o bilhar é pseudointegrável também.

Em vista disso, o cálculo do *genus* do bilhar da Fig. 5.5(a) é realizado usando os ângulos de um losango, com dois ângulos $\theta = \frac{m\pi}{n}$ e dois ângulos $\rho = \frac{n-m}{n}\pi$. Como $\mathcal{N} = \text{mmc}(n, n, n, n) = n$, segue-se da Eq. (2.4) que o *genus* da superfície invariante S das Figs. 5.5(b) ou (c) é

$$G(S) = n - 1, \quad (5.15)$$

com a representação gráfica em vermelho na Fig. 5.4. Assim, $n = 2$ é o único caso em que o *genus* é um, ou seja, $\gamma = 1$. Em todos os demais casos, o bilhar da Fig. 5.5(a) é

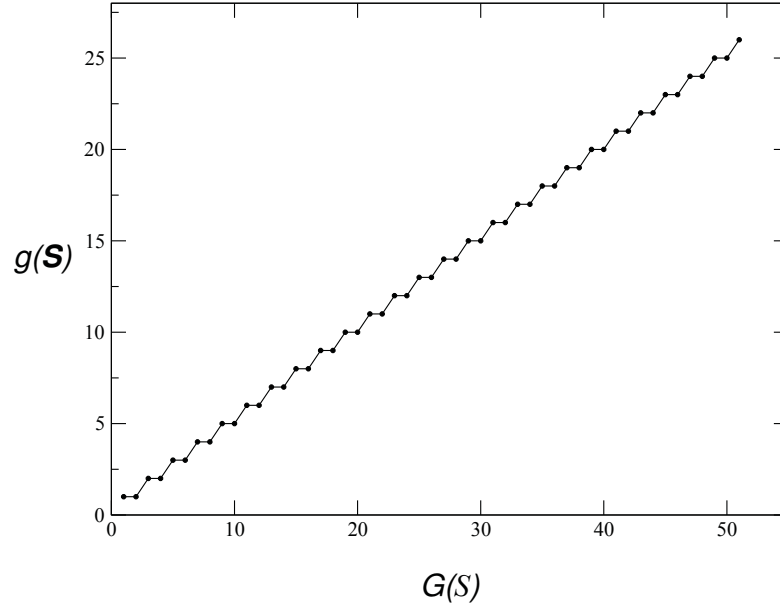


Figura 5.6: Representação gráfica de $g(\mathcal{S})$ em função de $G(S)$ mostrando que dois valores diferentes de $G(S)$ estão associados a um mesmo valor de $g(\mathcal{S})$ (patamares) de modo que $g(\mathcal{S}) < G(S)$, exceto o caso associado a $\gamma = 1$

pseudointegrável, mesmo se um dos ângulos, θ ou ρ , tiver o numerador igual a um, pois o seu suplementar³ terá um numerador maior que um, ou seja, é inevitável o espalhamento difrativo para $n > 2$. Comparando com as Eqs. (5.13) e (5.14), temos, respectivamente,

$$g(\mathcal{S}) = \begin{cases} \frac{G(S)+1}{2}, & G(S) \text{ ímpar} \\ \frac{G(S)}{2}, & G(S) \text{ par} \end{cases}, \quad (5.16)$$

ou, equivalentemente,

$$g(\mathcal{S}) = \frac{G(S)}{2} + \frac{1 - (-1)^{G(S)}}{4}, \quad (5.17)$$

o que mostra que o *genus* de um bilhar retangular com parede permeável é sempre maior que o *genus* de bilhares triângulo retângulo, exceto o caso do quadrado, no qual $g(\mathcal{S}) = G(S)$ (veja as Figs. 5.4 e 5.6).

A Eq. (5.15) mostra uma relação direta entre o inteiro n do ângulo θ e o *genus* $G(S)$, o que permite expressar a Eq. (4.36) como uma expansão de ondas planas em termos do $G(S)$,

$$\Psi(x_1, x_2) = \sum_{l=1}^{G(S)+1-m} \left[A_l \begin{Bmatrix} a_l \\ \bar{a}_l \end{Bmatrix} e^{i(\alpha^{(l)}x_1 + \beta^{(l)}x_2)} + A_{l+m} \begin{Bmatrix} \bar{a}_{l+m} \\ a_{l+m} \end{Bmatrix} e^{i(\alpha^{(l)}x_1 - \beta^{(l)}x_2)} + \right.$$

³Dois ângulos são suplementares se a sua soma for 180° ou π .

$$\begin{aligned}
 & + B_l \left\{ \begin{array}{c} \bar{a}_l \\ a_l \end{array} \right\} e^{i(-\alpha^{(l)}x_1 - \beta^{(l)}x_2)} + B_{l+m} \left\{ \begin{array}{c} a_{l+m} \\ \bar{a}_{l+m} \end{array} \right\} e^{i(-\alpha^{(l)}x_1 + \beta^{(l)}x_2)} \Big] + \\
 & + \sum_{l=G(S)+2-m}^{G(S)} \left[A_l \left\{ \begin{array}{c} a_l \\ \bar{a}_l \end{array} \right\} e^{i(\alpha^{(l)}x_1 + \beta^{(l)}x_2)} + A_{l-G(S)+1+m} \left\{ \begin{array}{c} \bar{a}_{l-G(S)+1+m} \\ a_{l-G(S)+1+m} \end{array} \right\} e^{i(-\alpha^{(l)}x_1 + \beta^{(l)}x_2)} + \right. \\
 & \left. + B_l \left\{ \begin{array}{c} \bar{a}_l \\ a_l \end{array} \right\} e^{i(-\alpha^{(l)}x_1 - \beta^{(l)}x_2)} + B_{l-1} \left\{ \begin{array}{c} a_{l-G(S)+1+m} \\ \bar{a}_{l-G(S)+1+m} \end{array} \right\} e^{i(\alpha^{(l)}x_1 - \beta^{(l)}x_2)} \right] + \\
 & + A_{G(S)+1} \left\{ \begin{array}{c} a_{G(S)+1} \\ \bar{a}_{G(S)+1} \end{array} \right\} e^{i(-\alpha^{(G(S)+1)}x_1 + \beta^{(G(S)+1)}x_2)} + A_m \left\{ \begin{array}{c} \bar{a}_m \\ a_m \end{array} \right\} e^{i(\alpha^{(G(S)+1)}x_1 + \beta^{(G(S)+1)}x_2)} + \\
 & + B_m \left\{ \begin{array}{c} a_m \\ \bar{a}_m \end{array} \right\} e^{i(-\alpha^{(G(S)+1)}x_1 - \beta^{(G(S)+1)}x_2)} + B_{G(S)+1} \left\{ \begin{array}{c} \bar{a}_{G(S)+1} \\ a_{G(S)+1} \end{array} \right\} e^{i(\alpha^{(G(S)+1)}x_1 - \beta^{(G(S)+1)}x_2)}.
 \end{aligned} \tag{5.18}$$

Isso significa que, quanto maior for o valor do *genus*, maior será o número de ondas planas na superposição. Consequentemente, no limite de não integrabilidade, a Eq. (5.18) é uma superposição de infinitas ondas planas, concordando com a Conjectura de Berry: em sistemas quanticamente não integráveis, a função de onda do sistema é uma superposição aleatória de ondas planas.

Lembrando da análise para bilhares triângulo retângulo, o numerador de um dos ângulos internos estabelece uma família de bilhares com o mesmo valor de *genus* $g(\mathcal{S})$. Isso acontece também para o numerador m do ângulo θ , ou seja, para cada valor fixo de $G(S)$, o inteiro m pode gerar expansões diferentes de funções de onda com o mesmo número de onda planas.

Bilhar Pipa

No Capítulo 4, usando a simetria de reflexão, obtemos para $\gamma = 3$ um bilhar pipa com uma parede permeável em uma de suas diagonais. Na ausência da parede permeável, o bilhar pipa tem dois ângulos retos, um ângulo $\frac{\pi}{3}$ e um ângulo $\frac{2\pi}{3}$. Substituindo os respectivos numeradores e denominadores na Eq. (2.4), o resultado do *genus* é dois, ou seja, o bilhar é pseudointegrável e a dinâmica do sistema fica confinada em um bitoro. A inserção de uma parede permeável ao longo da sua diagonal maior (veja a Fig. 5.7(a)) equivale à inserção de uma parede permeável na região de união dos dois toros (veja a Fig. 5.7(b)), sendo responsável pela probabilidade da trajetória da partícula passar de um toro para o outro. Isso mostra que o bilhar pipa permanecerá pseudointegrável. Esse é um contraexemplo de que a simetria de reflexão não garante uma função de onda por

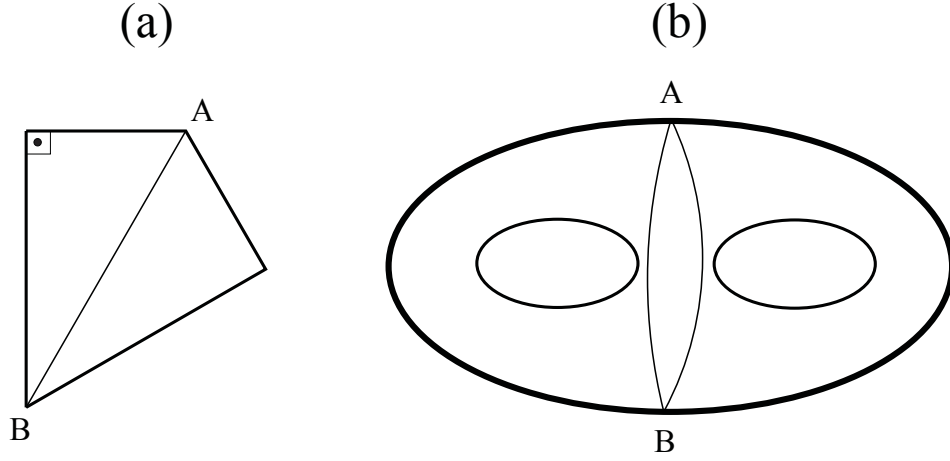


Figura 5.7: (a) Bilhar pipa com parede permeável \overline{AB} construído pela reflexão de um triângulo hemiequilátero em relação a sua hipotenusa. (b) Bitoro representando o bilhar pipa com parede permeável AB na região de união dos dois toros.

Ansatz de Bethe.

5.4.2 Estatística de Níveis de Energia Vizinhos para Bilhares não Integráveis com Parede Permeável

Para testar o modelo da subseção 5.4.1, realizamos a estatística dos níveis de energia próximos para $\gamma = 3$ e $\gamma = \frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}-1}$ a partir do MCP⁴ [179,180], variando-se a transmissão T ⁵ de $1,0 \times 10^{-10}$ a $0,999999999$, iniciando-se praticamente de um bilhar triângulo retângulo para um bilhar retangular. O caso $\gamma = 3$ na Fig. 5.8 é um pouco especial para se analisar, pois $P(s)$ para bilhares triangulares integráveis e para retângulos comensuráveis são bastante particulares, fugindo do comportamento normalmente esperado, ou seja, Poisson (veja os gráficos da primeira linha da Fig. 5.8 correspondente às transmissões $T = 1,0 \times 10^{-10}$ e $T = 0,999999999$). Mas, nitidamente, para T intermediário, a estatística não é GOE, mas tão pouco é um Poisson claro, ilustrando algum tipo de mistura de estados, parecendo concordar com a previsão do nosso modelo de que o *genus* é dois, enquanto a permeabilidade da parede for finita. Especificamente falando, a distribuição para $T = 1,0 \times 10^{-10}$ não é Poisson, por conta de aspectos geométricos do bilhar que geram autovalores de energia múltiplos de uma constante, ou seja, gerando uma correlação entre os autovalores de energia, que se manifesta como histogramas separados [134].

Para $\gamma = \frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}-1}$, o bilhar é um triângulo retângulo já conhecido por possuir um *genus* igual a dois e, como se observa na segunda linha da Fig. 5.8, a estatística de níveis de

⁴A elaboração dessa estatística é uma colaboração do Prof. Dr. Fábio M. Zanetti.

⁵A transmissão T da parede permeável é tanto maior (menor) quanto menor (maior) for a intensidade λ do potencial de interação das duas partículas.

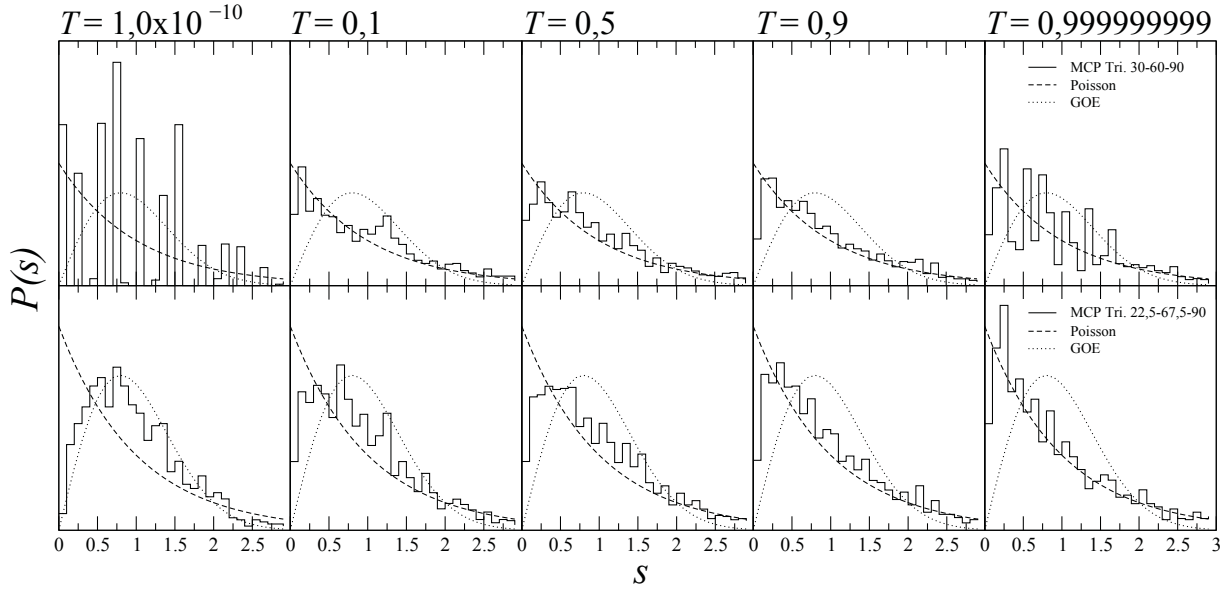


Figura 5.8: Gráficos da distribuição dos níveis de energia mostrando como ela muda com o aumento da transmissão de uma partícula pela parede permeável para $\gamma = 3$ e $\gamma = \frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}-1}$. Durante a transição, observa-se que a distribuição dos níveis de energia tende a GOE, indicando a elevação do valor do *genus*. Esta figura é uma contribuição do Prof. Dr. Fábio M. Zanetti.

energia tem um perfil GOE. Esta estatística, apesar de um pouco deformada, se mantém até um valor de transmissão próximo de $T = 0,5$. A partir desse valor, a estatística de níveis tende à distribuição de Poisson para valores crescentes de transmissão, como esperado (recaindo no bilhar retangular, desta vez com lados incomensuráveis).

É curioso neste caso que o aumento do *genus* de dois para três (quando T vai de zero para um valor finito, mas não um, ou seja, 100%) não se traduz na manutenção de $P(s)$ como sendo uma distribuição GOE bem clara. Uma possível interpretação é que o tunelamento, que acaba “colando” um toro de *genus* dois, com um toro de *genus* um, resultando num toro de *genus* três, faz o sistema ficar mudando entre o espaço de fases de topologia do triângulo não integrável (de *genus* dois) para um espaço de fases de topologia do retângulo (de *genus* um). Então, este processo deixa o espectro quântico mais regular do que o do triângulo isolado, dando os perfis intermediários de $P(s)$ como observando na Fig. 5.8. Quando T finalmente tende a um, temos a dinâmica em um toro e, portanto, $P(s)$ fica descrita pela distribuição de Poisson.

Conclusão

Esta tese se propôs a discutir um problema fundamental em Mecânica Quântica, que são as condições que eventualmente coíbem a integrabilidade de um sistema quântico. Nossos resultados negativos não mostram como resolver o problema, mas entender em que situações ele não tem solução através do *Ansatz* de Bethe. Essa é uma questão de Física Matemática que ajuda a entender um pouco mais os fundamentos da Física Geral, além de ser importante para desvendar um dos principais problemas da Física atual, o exato limite entre o mundo clássico e o mundo quântico.

Desde a década de 1930, o *Ansatz* de Bethe (a suposição de que a função de onda de um sistema é a superposição finita de ondas planas), tem sido aplicado para resolver diversos problemas importantes com um viés aplicado, como sistemas de cadeias de *spin*, sistemas unidimensionais de muitas partículas, bósons e/ou férmions, interagentes por potenciais locais, mas, ao longo do tempo, percebeu-se a sua relação com questões fundamentais, como a integrabilidade em Mecânica Quântica. No entanto, a integrabilidade quântica apoiada em soluções por *Ansatz* de Bethe não é geral o suficiente, pois exclui sistemas com interações não locais e sistemas com partículas de massas diferentes em sua maioria. Em vista disso, escolhemos o sistema clássico de duas partículas interagentes por um potencial delta de Dirac em uma caixa 1D para entender os detalhes das restrições do *Ansatz* de Bethe. Esse sistema é conveniente, porque ele gera um conjunto finito de pares de momentos (estados) para certas razões de massas γ nas sucessivas colisões das partículas. Então, para cada par de estados antes e depois de uma colisão elástica desse conjunto, fizemos corresponder a um par de ondas planas devida à função de onda de espalhamento (solução base) obtida pela solução do problema quântico análogo, mas com as partículas inicialmente livres na região 1D. Após exaurir todos os momentos do conjunto, obtemos uma função de onda do tipo *Ansatz* de Bethe estendida. A esse procedimento definimos,

como descrição semiclássica.

Para aplicar as condições de contorno de anulamento da função de onda nas paredes, estendemos o método usado no modelo de Gaudin para determinar as amplitudes da função de onda em termos das amplitudes associadas ao movimento relativo das partículas. Para $\gamma = 1$, que é classicamente integrável, obtemos a função de onda por *Ansatz* de Bethe, como previsto por esse modelo.

No entanto, para o caso classicamente integrável $\gamma = 3$, apesar da função de onda se anular em $x_1 = 0$ e em $x_2 = \sqrt{3}L$, as equações de Bethe não são consistentes entre si para valores finitos de λ do potencial delta de Dirac, comprometendo a condição de quantização do sistema. No limite de λ infinito, recuperamos a função de onda já conhecida do bilhar hemiequilátero, juntamente com as condições de quantização apropriadas. Por outro lado, apesar das equações de Bethe obtidas pelo anulamento da função de onda em $x_1 = 1L$ serem consistentes entre si, a função de onda não se anula em $x_1 = 0$, pois resulta em uma soma de duas quantidades complexas conjugadas. Isso já mostra que o *Ansatz* de Bethe não funciona para esse caso. Mesmo assim, exploramos outras possibilidades para resolver esse problema, como acrescentar recorrentemente múltiplos de amplitudes das ondas planas, a fim de satisfazer as condições de contorno em algum momento, mas revelou-se impossível em uma superposição finita, e também usar a simetria de reflexão inversa, para obter a função de onda em $x_1 \geq \frac{x_2}{\sqrt{3}}$ a partir da função de onda válida em $x_1 \leq \frac{x_2}{\sqrt{3}}$, mas isso implicou em uma descontinuidade da função em $x_1 = \frac{x_2}{\sqrt{3}}$.

Usando a reflexão especular, a função de onda em $x_1 \leq \frac{x_2}{\sqrt{3}}$ é refletida em relação à $x_1 = \frac{x_2}{\sqrt{3}}$, gerando um bilhar pipa ou *kite*. No entanto, apesar da função de onda se anular nas paredes do bilhar, a quantização permanece comprometida, pois as equações de Bethe inconsistentes entre si são as mesmas. Mas isso não é um problema, porque o bilhar pipa já é pseudointegrável na ausência da parede permeável em $x_1 = \frac{x_2}{\sqrt{3}}$ e, assim não pode admitir uma solução do tipo *Ansatz* de Bethe, conforme o modelo topológico da Fig. 5.7. A importância desse resultado está em mostrar que a simetria de reflexão não é suficiente para alguns bilhares ter uma função de onda por *Ansatz* de Bethe.

Para o caso classicamente pseudointegrável $\gamma = \frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}-1}$, não há razão alguma para que seja quanticamente integrável. Ainda assim, a função de onda estendida para esse caso exhibe, além das incoerências da função de onda para $\gamma = 3$, a impossibilidade de se ter uma condição de quantização mesmo no caso hipotético de existir uma solução por ondas planas, devido a incomensurabilidade entre os momentos e o tamanho do bilhar nos argumentos da função.

O fato de o *Ansatz* de Bethe não funcionar para $\gamma = 3$ não permite concluir sobre a sua integrabilidade. Mostramos no Capítulo 5 que aberturas com ângulos possuindo numeradores iguais a 1, não levam a um espalhamento difrativo. Ora, esse parece ser o caso para $\gamma = 3$, pois todos os numeradores dos ângulos internos do bilhar correspondente são iguais a 1. Então, propomos um modelo inspirado no problema de um bilhar quadrado periódico contendo uma barreira quadrada, resolvido por Richens e Berry, interpretando a parede permeável como uma barreira. Obtemos, então, que a dinâmica do sistema ocorre em um toro com uma barreira em forma de losango. Isso implica que, pelo menos um dos ângulos do losango tem numerador maior do que 1, com a exceção do caso $\gamma = 1$. Sendo assim, para $\gamma = 3$, um dos ângulos é igual a $\frac{2\pi}{3}$, ou seja, haverá um espalhamento difrativo sempre que a partícula no bilhar for refletida duas vezes na hipotenusa, intercalado por uma colisão em um dos catetos do triângulo retângulo. Esse modelo permitiu calcular o *genus* para bilhares retangulares com uma parede permeável em sua diagonal, dando o valor dois para $\gamma = 3$, ou seja, ele é quanticamente pseudointegrável. A estatística de níveis, uma colaboração do Prof. Dr. Fábio Zanetti, tem corroborado esse resultado, pois essa estatística tem indicado uma transição para um perfil de mistura de estados. Apesar de não ser claramente GOE, enquanto a probabilidade de transmissão estiver entre os limites nulo e unitário, claramente observamos mudanças no perfil de $P(s)$.

A equação do *genus* mostra que seu valor é maior que o do *genus* de um bilhar triângulo retângulo e as estatísticas de níveis de energia para $\gamma = \frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}-1}$ tem indicado esse resultado. Entretanto, aumentar o *genus* (o caso aqui) não necessariamente indica que o sistema ficará mais caótico, $P(s)$ mais próximo do GOE. O aumento do *genus* talvez tenha uma interpretação em termos de tunelamento. Ao tunelar para uma parte do espaço de fases onde a topologia local é mais parecida com um toro de *genus* um, talvez o espectro passe a ficar um pouco mais regular do que quando estava confinado em um toro de *genus* menor (lembre-se que o modelo é de um toro com barreira, modificando o *genus*), mas levando a irregularidade maior.

Além disso, o *genus* para esses bilhares retangulares depende apenas do denominador do ângulo $\theta = \frac{m\pi}{n}$, o que permite expressar a função de onda estendida como uma superposição de uma quantidade de ondas planas definida pelo *genus*. Ora, como mostramos para bilhares triângulo retângulo clássicos, o numerador m estabelece uma família de bilhares triângulo retângulo com o mesmo valor de *genus*, ou seja, para um *genus* fixo, pode haver mais de uma expansão da função de onda do tipo *Ansatz* de Bethe. Assim, no limite de *genus* infinito, essa função de onda passa a ser uma superposição de infinitas ondas planas, o que remete à Conjectura de Berry para sistemas quanticamente caóticos.

Obviamente que os resultados do Capítulo 4 e da interpretação dada no Capítulo 5 se esgotam em si mesmos. Em uma análise semiclássica, alguém poderia propor uma forma distinta de calcular o *genus*, não baseado no trabalho de Richens e Berry. Ou ainda, dada a nossa forma de calcular o *genus* em um sistema semiclássico com tunelamento, ainda resta uma forma concreta de interpretação dos resultados. Nos propomos interpretar este aumento de *genus* não apenas como uma maior complicação do espaço de fases, como topologias de toro, mas com mais toros individuais. É necessário também entender como as dinâmicas locais em cada região localizada desses toros individuais pode complicar ou simplificar a dinâmica do sistema, uma vez que o sistema fica “tunelando” entre essas regiões. Isto exige mais análises no futuro, considerando tanto a dinâmica clássica em tais topologias, como análises quânticas adicionais. Por exemplo, outras distribuições para o espectro, como Δ_3 [118] poderiam nos ajudar nesta análise, bem como fazer análises de Seção de Poincaré, mas investigando a evolução em regiões específicas do espaço de fases do sistema clássico correspondente.

Como perspectivas de trabalhos futuros pode-se pensar em aplicar esses resultados para investigar outros bilhares relativamente simples, com paredes permeáveis, que não sabemos ainda se admitem uma solução *Ansatz* de Bethe consistente, como:

- um bilhar retangular com uma parede permeável \overline{AB} paralela em relação a um dos seus lados e assimétrica, Fig. 6.1(a). Se este bilhar admitir uma solução por *Ansatz* de Bethe, será um contraexemplo bidimensional de que os requisitos de simetria não são necessários para alguns bilhares;
- o bilhar triângulo equilátero com uma parede permeável AB coincidindo com uma de suas bissetrizes, Fig. 6.1(b): este bilhar é obtido refletindo-se o triângulo hemiequilátero em relação ao cateto maior e, mesmo que os ângulos internos tenham numeradores iguais a 1, a sua superfície invariante obtida por *unfolding* exibe uma aparente descontinuidade;
- o bilhar triângulo isósceles, com dois ângulos internos iguais a 30° e o terceiro ângulo sendo 120° , com uma parede permeável em sua bissetriz Fig. 6.1(c): possivelmente não admite uma solução do tipo *Ansatz* de Bethe, por causa do ângulo de 120° que originará espalhamento difrativo.

Outros encaminhamentos possíveis para este trabalho são:

- desenvolver uma teoria genuinamente semiclássica para comparar os resultados desta tese como, por exemplo, o cálculo do *genus*;
- mostrar que uma equação de Yang-Baxter para sistemas confinantes é satisfeita para $\gamma = 1$ mas não para $\gamma = 3$;
- desenvolver uma análise semelhante ao realizado para três partículas na reta [156] para

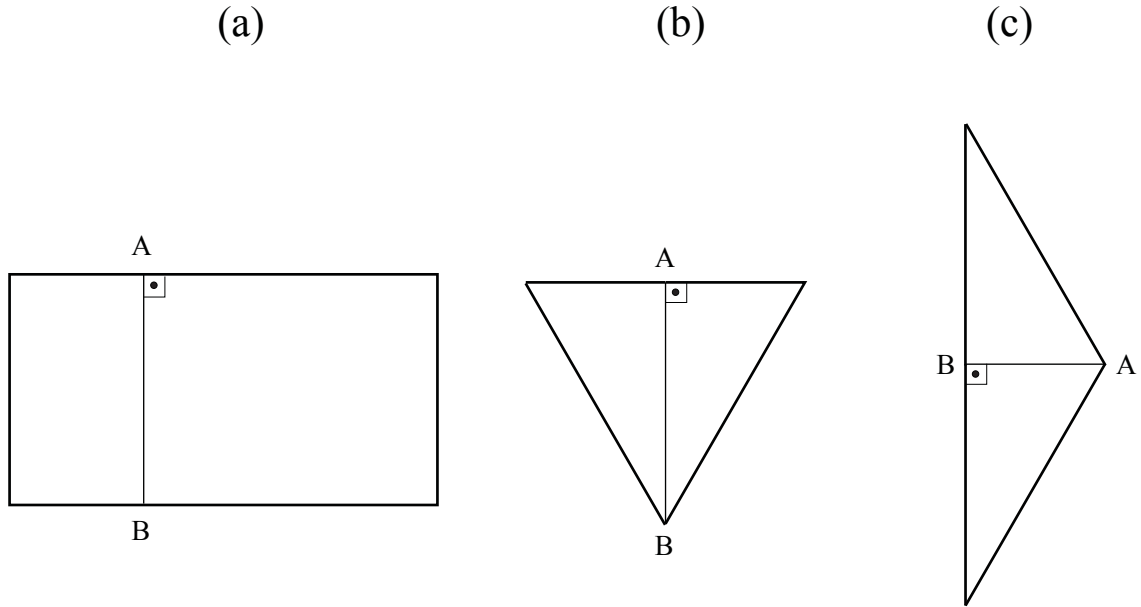


Figura 6.1: (a) Bilhar retangular com parede permeável \overline{AB} assimétrica. (b) Bilhar triângulo equilátero com uma parede permeável \overline{AB} em uma de suas bissetrizes. (c) Bilhar triângulo isósceles com a parede permeável na bissetriz do triângulo obtuso.

investigar o efeito difrativo via *Ansatz* de Sommerfeld;

- como aproximações semiclássicas funcionam melhor para níveis de energia do que para funções de onda em si, os desenvolvimentos feitos aqui poderiam ter uma utilidade prática como ser uma base para uma teoria de perturbação, ao menos para obter os valores dos níveis de energia.

Integrabilidade em Mecânica Clássica

A Mecânica Clássica oferece uma maneira para se identificar se a dinâmica do sistema é regular através da ideia de integrabilidade. Explanamos rapidamente sobre isso. Em Mecânica Clássica, para um sistema com f graus de liberdade, escolhendo-se uma condição inicial de posição e momento, (q_i, p_i) , com $0 < i \leq f$, a dinâmica do sistema é governada de forma determinística pelas equações de Hamilton

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}(q, p)}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}(q, p)}{\partial q_i},$$

em que $(q, p) = (q_1, \dots, q_i, \dots, q_f, p_1, \dots, p_i, \dots, p_f)$ definem um espaço de dimensão $2f$ denominado de espaço de fases \mathbf{P}^{2f} . Assim, em princípio, é necessário resolvermos $2f$ equações diferenciais de primeira ordem. No entanto, se o sistema for conservativo, o hamiltoniano do sistema $\mathcal{H}(q, p)$ coincidirá com a energia total E . Dessa forma, $\mathcal{H}(q, p) = E$ é uma constante de movimento que define uma superfície unidimensional que impõe um limite às trajetórias possíveis do sistema dinâmico. Então, temos que resolver agora $2f - 1$ equações diferenciais. À medida que for possível obter mais constantes de movimento, diminui-se o número de equações de movimento a serem resolvidas e aumenta-se a dimensão da superfície limitadora das trajetórias. Quando houver f constantes de movimento $C_i(q, p)$, as trajetórias do sistema estarão limitadas à uma superfície f -dimensional no espaço de fases \mathbf{P}^{2f} , determinando-a completamente. Então, para constantes de movimento $C_i(q, p)$ tais que $\nabla C_i(q, p)$ sejam linearmente independentes e o parênteses de Poisson $\{C_i(q, p), C_j(q, p)\} = 0$, em que

$$\{C_i(q, p), C_j(q, p)\} = \sum_{\ell=1}^f \left(\frac{\partial C_i(q, p)}{\partial q_\ell} \frac{\partial C_j(q, p)}{\partial p_\ell} - \frac{\partial C_i(q, p)}{\partial p_\ell} \frac{\partial C_j(q, p)}{\partial q_\ell} \right),$$

o sistema é *completamente integrável*.

Dessa forma, nos sistemas integráveis, é possível uma mudança de coordenadas que trivializa o hamiltoniano e preserve as equações de Hamilton (transformações canônicas e denotadas aqui como tc), expressando-o tão somente em função das constantes de movimento e, por conseguinte, resolvendo facilmente o problema. Então, sendo $(q, p) \in \mathbf{P}^{2f}$ e as novas coordenadas de posição e momento $(Q, P) \in \mathbf{P}_{tc}^{2f}$, com $Q = Q(q, p)$ e $P = P(q, p)$, a imposição de que o lagrangeano¹

$$\mathcal{L}(q, \dot{q}) = \sum_{i=1}^f \left(\frac{m_i \dot{q}_i^2}{2} - U(q_i) \right),$$

em que $U(q_i)$ é a energia potencial, independa de Q no espaço de fases \mathbf{P}_{tc}^{2f} , conduz P a ser uma constante de movimento, conforme se obtém da equação de Euler-Lagrange

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}(q, \dot{q}, t)}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}(q, \dot{q}, t)}{\partial q} = 0,$$

nas coordenadas do espaço \mathbf{P}^{2f} . Consequentemente, sendo $\mathcal{H}_{tc}(P)$ o novo hamiltoniano, temos as equações de Hamilton

$$\frac{dQ_i}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}_{tc}(P)}{\partial P_i}, \quad \frac{dP_i}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}_{tc}(P)}{\partial Q_i},$$

cuja solução é

$$Q_i = Q_{i0} + \omega_i t, \quad P_i = I_i,$$

com $\omega_i = \frac{\partial \mathcal{H}_{tc}(P)}{\partial P_i}$ e I_i constante. Como o sistema é integrável, pares (q_i, p_i) são independentes entre si, o que significa que o sistema é separável e, por isso, tem uma periodicidade intrínseca, seja porque o hamiltoniano $\mathcal{H}(q, p)$ é quadrático em p_i (o que limita os valores das coordenadas q_i a intervalos finitos, ou *libração*), seja porque p_i é uma função periódica de q_i , ou *rotação*. Isso implica que o plano definido por (q_i, p_i) é limitado, valendo o mesmo para (Q_i, P_i) . Então, podemos assumir que Q_i é periódica com período 2π . Por outro lado, como a contante $P_i = I_i$ e $p_i = \int dp_i$, segue-se que

$$I_i = \frac{1}{2\pi} \int p_i dq_i,$$

que é a variável de ação. Por ser Q_i periódica, ela é, efetivamente, uma variável de ângulo

¹Pois está implícito o termo “funcional”, um substantivo masculino.

ϕ . Então, podemos definir $(Q, P) := (\phi, I)$, de modo que a solução final seja

$$I_i = \tilde{c}_i, \quad \phi_i = \phi_{i0} + \omega_i t, \quad (\text{A.1})$$

com \tilde{c}_i uma constante, $\phi_i \in [0, 2\pi]$.

Isso significa que as soluções I_i e ϕ_i representam o raio e a trajetória sobre uma circunferência \mathbb{S}^1 . Então, para todos os valores i , temos o produto cartesiano de f circunferências \mathbb{S}^1 , o que define, topologicamente, um toro f -dimensional $\mathbb{T}^f = \mathbb{S}^1 \times \dots \times \mathbb{S}^1$. A Fig. A.1 ilustra um caso particular dessa relação. Isso mostra que as órbitas de um sistema dinâmico integrável confinam-se em um toro.

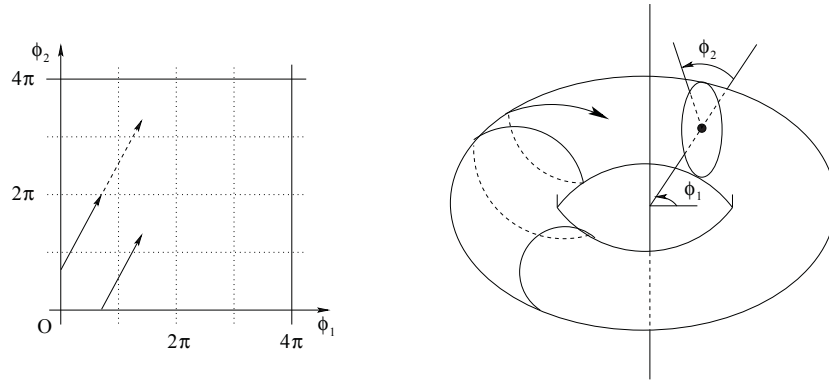


Figura A.1: Relação entre variáveis de ação-ângulo e o toro invariante \mathbb{T}^2 : como as variáveis ângulo são periódicas, no gráfico $\phi_1 - \phi_2$, a parte da trajetória que está fora do intervalo $[0, 2\pi]$ (segmento pontilhado), é reposicionado nesse intervalo. Isto corresponde à trajetória periódica no toro.

Grupo Diedral

B.1 Grupo

Seja o conjunto $G \neq \emptyset$ e uma lei de composição interna $(x, y) \mapsto x \star y$ em G . G é um grupo em relação a essa lei se, e somente se:

1. $(\forall a, b, c \in G)(a \star (b \star c) = (a \star b) \star c)$ (associatividade);
2. $(\forall a \in G)(\exists e \in G)(a \star e = e \star a = a)$ (existência de elemento neutro);
3. $(\forall a \in G)(\exists a' \in G)(a \star a' = a' \star a = e)$ (existência de elemento simétrico).

Como consequência [128], os elementos neutro e simétrico são únicos; dado um elemento qualquer do grupo, o simétrico do simétrico é o próprio elemento; o simétrico de $a \star b$ é $b \star a$.

Um grupo (G, \star) é abeliano ou comutativo se, e somente se, $(x, y) \mapsto x \star y$ é comutativa, ou seja, $(\forall a, b \in G)(a \star b = b \star a)$.

B.2 Grupo Diedral

Grupo Diedral é um grupo de n simetrias (invariância) de rotação e n de reflexão de polígonos n -regulares em torno da origem. Portanto, este grupo possui $2n$ elementos e o denotemos por \mathcal{D}_{2n} .

Dessa forma, as rotações são ângulos múltiplos racionais de π . Então, considere rotações anti-horárias em torno da origem por ângulos $(k - 1)\frac{2\pi}{n}$, com inteiro $k \in [1, n)$, a

n -ésima rotação coincidindo com a rotação $k = 1$, a $(n + 1)$ -ésima rotação coincidindo com a rotação $k = 2$, etc. O conjunto dessas rotações, $R_n = \{e, a, \dots, a^{n-1}\}$, com $a^n = e$, juntamente com a composição de duas rotações quaisquer (o símbolo \star é omitido e a composição de rotações é representada por justaposição), possuem as propriedades definidoras de grupo, denominado de grupo de rotações módulo n [128]. Assim, para dois elementos de rotação quaisquer $a^{\mathfrak{r}}, a^{\mathfrak{s}} \in R_n$, temos $a^{\mathfrak{r}}a^{\mathfrak{s}} = a^{\mathfrak{r}+\mathfrak{s}}$, $(\mathfrak{r} + \mathfrak{s}) \bmod n$ é um elemento de rotação de R_n ; para $\mathfrak{s} = n - \mathfrak{r}$, obtemos o elemento neutro do grupo, $a^{\mathfrak{r}}a^{n-\mathfrak{r}} = a^n = e$, ou seja, $a^{n-\mathfrak{r}}$ é o elemento simétrico de $a^{\mathfrak{r}}$.

A reflexão b do Grupo Diedral é aquela em relação à abscissa, de modo que $b^2 = e$; apliquemos em cada rotação de R_n a reflexão b , obtendo-se explicitamente \mathcal{D}_{2n} ,

$$\mathcal{D}_{2n} = \{e, a, \dots, a^{n-1}, b, ba, \dots, ba^{n-1}\}. \quad (\text{B.1})$$

Os elementos do Grupo Diedral possuem as seguintes propriedades operacionais:

- $ab = ba^{n-1}$;
- $a^r b = b a^{n-r}$.

B.3 Grupo Multiplicativo Cíclico

Grupo Multiplicativo Cíclico G é o grupo fechado em relação à multiplicação que possui um elemento $a \in G$ tal que $G = \{a^{\mathfrak{m}} | \mathfrak{m} \in \mathbb{Z}\}$. Este elemento é dito um gerador de G .

Os Grupos Multiplicativos Cíclicos podem ser:

- **finitos**, quando existe um inteiro não nulo \mathfrak{p} tal que $a^{\mathfrak{p}} = e$. Se este inteiro for o menor possível, \mathfrak{p} é dito período ou ordem do grupo;
- **infinitos**, quando não for finito; logo, o período $\mathfrak{p} = 0$.

O Grupo Diedral é um grupo multiplicativo cíclico, com dois geradores, um correspondendo ao gerador de rotações, a , e o outro, à reflexão, b .

Cálculo do *Genus* para Alguns Bilhares Poligonais em Termos do Número de Faces, de Arestas e de Vértices

A Eq. (2.4) para o *genus* de um polígono racional de h lados foi deduzida a partir do número de faces F , de arestas E e de vértices V [101, 106] dados, respectivamente, por

$$F = 2\mathcal{N}, \quad E = \mathcal{N}h, \quad V = \mathcal{N} \sum_{j=1}^h \frac{1}{n_j}, \quad (\text{C.1})$$

em que $\mathcal{N} = \text{mmc}(n_1, \dots, n_h)$, relacionados conforme a equação característica de Euler, Eq. (2.2). Chamamos esse procedimento de **Método 1**. Há outra maneira para se determinar o *genus*, que é a determinação de F , E e V já considerando a identidade dos lados opostos da superfície invariante \mathcal{S} . A esse procedimento, chamamos de **Método 2**. Aplicamos esses dois métodos para o cálculo do *genus* para os bilhares quadrado, triângulo retângulo isósceles, triângulo hemiequilátero e o triângulo retângulo de ângulo $\frac{\pi}{8}$.

C.1 Bilhar Quadrado

Método 1: Considere a superfície invariante \mathcal{S} gerada por *unfolding* do bilhar quadrado, Fig. C.1(a). Nesse caso, $h = 4$ e $\mathcal{N} = \text{mmc}(2, 2, 2, 2) = 2$, pois todos os seus ângulos internos são retos. Assim, o número de faces, de arestas e de vértices são, pela Eqs. (C.1):

$$F = 4, \quad E = 8, \quad V = 4.$$

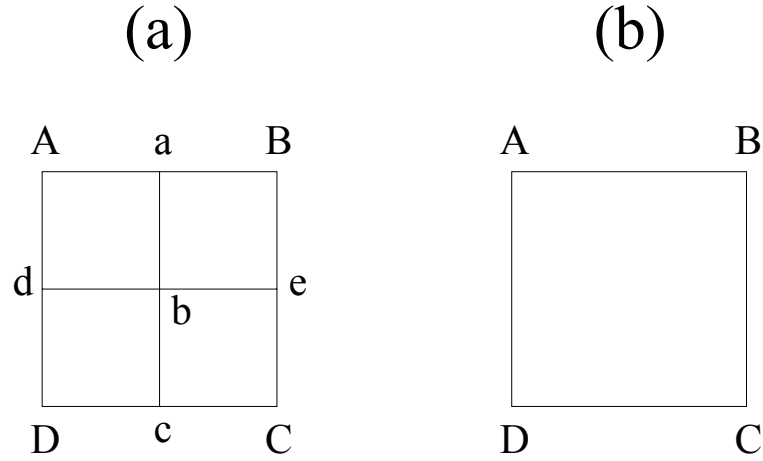


Figura C.1: Superfície invariante \mathcal{S} gerada pelo bilhar quadrado via *unfolding*: (a) formada por 4 quadrados; (b) formada por 1 quadrado com a identificação dos seus lados opostos, ignorando-se as subdivisões internas (planificação do toro).

Esse resultado pode ser visualizado na Fig. C.1(a):

- o número de faces é a quantidade de polígonos que formam a superfície \mathcal{S} , isto é, 4 quadrados formando um quadrado maior;
- o número de arestas corresponde às 4 arestas externas, \overline{AB} , \overline{BC} , \overline{CD} e \overline{DA} , e às 4 arestas internas \overline{ab} , \overline{bc} , \overline{db} e \overline{be} (claramente, as arestas compartilhadas são contadas apenas uma vez).
- os 4 vértices correspondem a A, B, C e D.

Desse modo, o *genus* dado pela Eq. (2.3) é $g(\mathcal{S}) = 1$.

Método 2: Nesse caso, a superfície invariante \mathcal{S} é o quadrado da Fig. C.1(b), com os lados opostos identificados, ou seja, $\overline{AB} \equiv \overline{CD}$ e $\overline{AD} \equiv \overline{BC}$. Em vista disso, temos apenas 1 quadrado, 2 arestas e 1 vértice (todos os 4 vértices do quadrado são identificados), ou seja, $F = 1$, $E = 2$ e $V = 1$, o que dá $g(\mathcal{S}) = 1$, conforme a Eq. (2.3).

C.2 Bilhar Triângulo Retângulo Isósceles

Método 1: Considere a superfície invariante \mathcal{S} gerada por *unfolding* do bilhar triângulo retângulo isósceles, Fig. C.2(a). Nesse caso, $h = 3$ e $\mathcal{N} = \text{mmc}(2, 4, 4) = 4$. Assim, as Eqs. (C.1) dão

$$F = 8, \quad E = 12, \quad V = 4,$$

e, pela Eq. (2.3), $g(\mathcal{S}) = 1$. Note que esse resultado concorda com a observação dos 8 triângulos retângulos isósceles, as 12 arestas (externas e internas) \overline{AB} , \overline{BC} , \overline{CD} , \overline{DA} , \overline{ab} , \overline{bc} , \overline{db} , \overline{be} , \overline{bA} , \overline{bB} , \overline{bC} , \overline{bD} e os 4 vértices A, B, C e D da Fig. C.2(a).

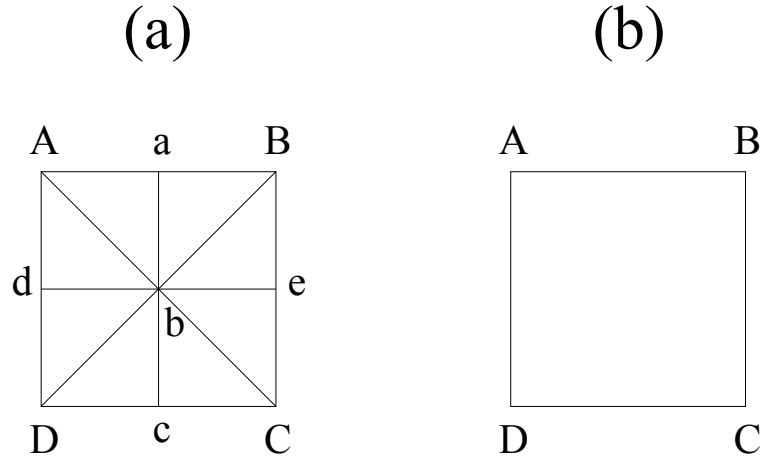


Figura C.2: Superfície invariante \mathcal{S} gerada pelo bilhar triângulo retângulo isósceles via *unfolding*: (a) formada por 8 triângulos retângulos isósceles; (b) formada por 1 quadrado com a identificação dos seus lados opostos, ignorando-se as subdivisões internas.

Método 2: Como a Fig. C.2(b) coincide com a Fig. C.1(b), imediatamente temos que $F = 1$, $E = 2$ e $V = 1$, ou seja, $g(\mathcal{S}) = 1$.

C.3 Bilhar Triângulo Hemiequilátero

Método 1: A superfície invariante \mathcal{S} gerada por *unfolding* do bilhar triângulo hemiequilátero é o hexágono mostrado na Fig. C.3(a). Como $h = 3$ e $\mathcal{N} = \text{mmc}(2, 3, 6) = 6$, as Eqs. (C.1) dão

$$F = 12, \quad E = 18, \quad V = 6,$$

cujos valores estão condizentes com o número de:

- triângulos hemiequiláteros que formam o hexágono;
- arestas: \overline{AB} , \overline{BC} , \overline{CD} , \overline{DE} , \overline{EF} , \overline{FA} , \overline{AO} , \overline{aO} , \overline{BO} , \overline{bO} , \overline{CO} , \overline{cO} , \overline{DO} , \overline{dO} , \overline{EO} , \overline{eO} , \overline{FO} , \overline{fO} ;
- vértices: A, B, C, D, E e F.

Consequentemente, $g(\mathcal{S}) = 1$ pela Eq. (2.3).

Método 2: A superfície invariante é o hexágono da Fig. C.3(b), em que os lados opostos \overline{AB} e \overline{DE} , \overline{BC} e \overline{EF} , \overline{CD} e \overline{FA} são identificados; assim, $F = 1$ e $E = 3$. Para se determinar o número de vértices, considere a Fig. C.4(a). As setas representam o sentido do movimento de uma partícula na superfície invariante da seguinte maneira: começando-se em A, a partícula passa por E e depois por C. Daí em diante, ele retorna para A novamente [195]. Isso define um vértice, conforme se vê na Fig. C.4(b). Com procedimento análogo aplicado aos cantos B, D e F, encontramos um segundo vértice,

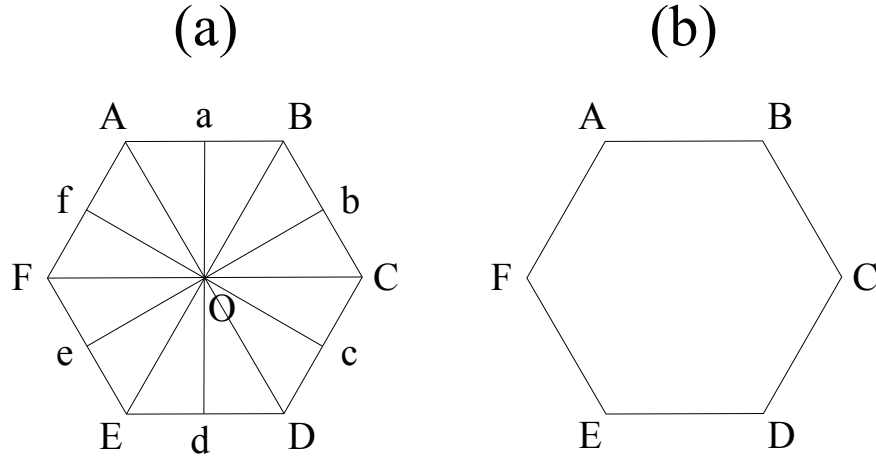


Figura C.3: Superfície invariante \mathcal{S} gerada pelo bilhar triângulo hemiequilátero via *unfolding*: (a) formada por 12 triângulos hemiequiláteros; (b) formada por 1 hexágono com a identificação dos seus lados opostos, ignorando-se as subdivisões internas.

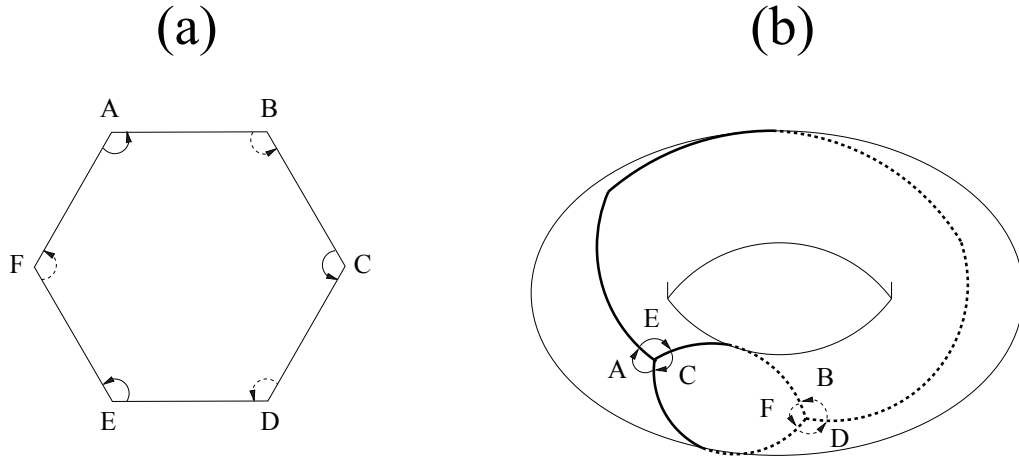


Figura C.4: (a) Devido a identificação dos lados opostos do hexágono, uma partícula partindo do canto A, conforme o sentido da seta, passará pelos cantos E e C, retornando ao canto A, definindo assim um vértice. Outro vértice é encontrado se a partícula partir, por exemplo, do canto B, passar por F e D, retornando ao canto B. (b) Esses dois vértices são representados pelo ponto em comum de A, E e C e também de B, F e D.

dando, então, $V = 2$. O *genus*, portanto, é $g(\mathcal{S}) = 1$ pela Eq. (2.3).

C.4 Bilhar Triângulo Retângulo de Ângulo $\frac{\pi}{8}$

Método 1: O *unfolding* de um triângulo retângulo de ângulo $\frac{\pi}{8}$ gera um octógono como superfície invariante \mathcal{S} . Como $h = 3$ e $\mathcal{N} = \text{mmc}(2, 8, 8) = 8$, temos pelas Eqs. (C.1):

$F = 16$, ou 16 triângulos retângulos de ângulo $\frac{\pi}{8}$;

$E = 24$, correspondendo às arestas \overline{AB} , \overline{BC} , \overline{CD} , \overline{DE} , \overline{EF} , \overline{FG} , \overline{GH} , \overline{HA} , \overline{AO} , \overline{aO} , \overline{BO} ,

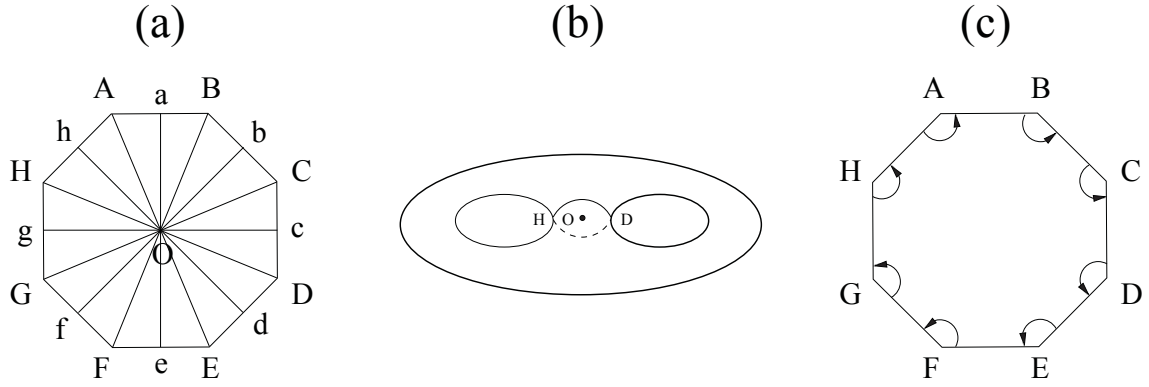


Figura C.5: (a) Superfície invariante \mathcal{S} gerada pelo bilhar triângulo retângulo de ângulo $\frac{\pi}{8}$ via *unfolding* formada por 16 triângulos retângulos de ângulo $\frac{\pi}{8}$. (b) Os vértices A, B, C, E, F e G correspondem ao ponto O no bitoro, enquanto D e H correspondem aos pontos “que ligam” os dois toros. (c) Superfície invariante \mathcal{S} formada por 1 octógono com a identificação dos seus lados opostos, ignorando-se as subdivisões em triângulos. Além disso, partindo-se de A, seguindo a orientação da seta e respeitando a identidade dos lados opostos do octógono, retorna-se ao canto A, mostrando que há apenas 1 vértice.

$\overline{bO}, \overline{cO}, \overline{dO}, \overline{eO}, \overline{fO}, \overline{gO}, \overline{hO}, \overline{hO}, \overline{gO}, \overline{fO}, \overline{eO}, \overline{dO}, \overline{cO}, \overline{bO}$;

$V = 6$, correspondendo à A, B, C, E, F e G. Os pontos D e H não contabilizados como vértices são responsáveis pela “ligação” entre os dois toros, conforme se vê na Fig. C.5(b).

Método 2: A superfície invariante é o octógono mostrado na Fig. C.5(c) com lados opostos identificados; logo $F = 1$ e $E = 4$. Considerando um movimento de uma partícula no canto A, com o sentido especificado pela seta, após a transição para F, C, H, E e B, retorna-se ao canto A, ou seja, todos os pontos correspondem a um único vértice, $V = 1$. Portanto, $g(\mathcal{S}) = 2$ pela Eq. (2.3).

Reflexão Especular no Bilhar Triângulo Retângulo

Demonstramos que a reflexão especular de uma partícula, que incide na hipotenusa de um bilhar triângulo retângulo, é satisfeita no caso geral apenas diante da transformação canônica

$$x_i = q_i \sqrt{m_i}, \quad P_i = \frac{p_i}{\sqrt{2m_i}}. \quad (\text{D.1})$$

Reflexão Especular no Espaço de Configuração \mathbf{C}^2

Considere o espaço de configuração \mathbf{C}^2 da Fig. D.1(a). A região triangular destacado pode ser interpretado como um bilhar triângulo retângulo isósceles, no interior do qual uma única partícula move-se com velocidade constante até que seja refletida nos catetos e na hipotenusa. A reflexão nos catetos é especular, pois nelas o estado depois $\mathbf{v}_d = (v_{1d}, v_{2d})$ é o estado antes com um dos seus componentes com sinal trocado,

$$\mathbf{v}_d = (v_{1d}, v_{2d}) = (-v_{1a}, v_{2a}),$$

se a partícula for refletida em $q_1 = 0$, e

$$\mathbf{v}_d = (v_{1d}, v_{2d}) = (v_{1a}, -v_{2a}),$$

se a partícula for refletida em $q_2 = L$.

Já a incidência na hipotenusa, a reflexão da partícula é de acordo com a equação

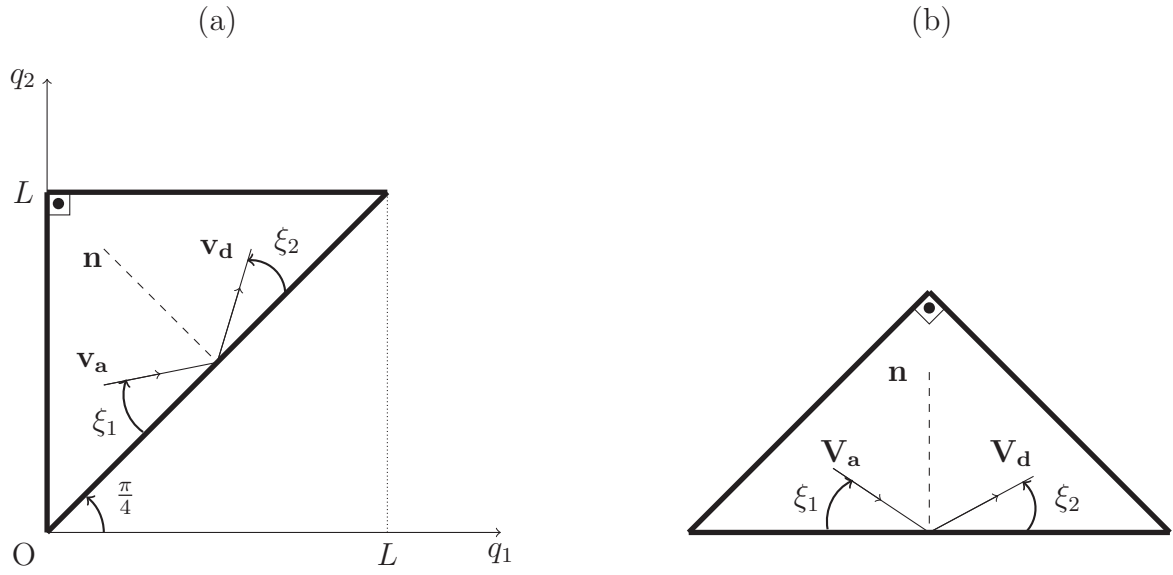


Figura D.1: (a) Espaço de configuração \mathbf{C}^2 : uma partícula com estado $\mathbf{v}_a = (v_{1a}, v_{2a})$ incide relativamente à hipotenusa em um ângulo ξ_1 e é refletida com estado $\mathbf{v}_d = (v_{1d}, v_{2d})$ em um ângulo ξ_2 relativamente à hipotenusa. (b) Região triangular do espaço de configuração \mathbf{C}^2 rotacionado de $\frac{\pi}{4}$ no sentido horário, em que \mathbf{V}_a e \mathbf{V}_d são os estados correspondentes rotacionados, com \mathbf{n} indicando a direção perpendicular à hipotenusa.

matricial

$$\mathbf{v}_d = \mathbf{M}(\gamma)\mathbf{v}_a \Leftrightarrow \begin{bmatrix} v_{1d} \\ v_{2d} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1-\gamma}{1+\gamma} & \frac{2\gamma}{1+\gamma} \\ \frac{2}{1+\gamma} & \frac{\gamma-1}{1+\gamma} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_{1a} \\ v_{2a} \end{bmatrix}. \quad (\text{D.2})$$

Para verificarmos se a partícula é refletida especularmente, rotacionamos o triângulo retângulo isósceles no sentido horário pelo ângulo $\frac{\pi}{4}$, obtendo-se a representação dada pela Fig. D.1(b). Desse modo, os estados \mathbf{v}_a e \mathbf{v}_d também serão rotacionados por esse mesmo ângulo. Considere

$$\mathbf{v}' = R_t(\zeta)\mathbf{v} \Leftrightarrow \begin{bmatrix} v'_1 \\ v'_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \zeta & -\sin \zeta \\ \sin \zeta & \cos \zeta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix}.$$

Para a rotação horária de $\frac{\pi}{4}$, obtemos

$$\mathbf{V}_a = R_t\left(-\frac{\pi}{4}\right)\mathbf{v}_a \Rightarrow \begin{bmatrix} V_{1a} \\ V_{2a} \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} v_{1a} + v_{2a} \\ -v_{1a} + v_{2a} \end{bmatrix},$$

e usando a Eq. (D.2),

$$\mathbf{V}_d = R_t\left(-\frac{\pi}{4}\right)\mathbf{v}_d \Rightarrow \begin{bmatrix} V_{1d} \\ V_{2d} \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \frac{3-\gamma}{1+\gamma}v_{1a} + \frac{3\gamma-1}{1+\gamma}v_{2a} \\ v_{1a} - v_{2a} \end{bmatrix}.$$

Agora, podemos determinar $\text{tg } \xi_1 = \frac{V_{2a}}{V_{1a}}$ e $\text{tg } \xi_2 = \frac{V_{2d}}{V_{1d}}$,

$$\text{tg } \xi_1 = \frac{-v_{1a} + v_{2a}}{v_{1a} + v_{2a}}, \quad \text{tg } \xi_2 = \frac{v_{1a} - v_{2a}}{(3 - \gamma)v_{1a} + (3\gamma - 1)v_{2a}}.$$

Os ângulos ξ_1 e ξ_2 estão no sentido horário e anti-horário, respectivamente. Então, se a reflexão for especular, devemos ter $\text{tg } \xi_1 = -\text{tg } \xi_2$, ou seja,

$$\frac{-v_{1a} + v_{2a}}{v_{1a} + v_{2a}} = \frac{-v_{1a} + v_{2a}}{(3 - \gamma)v_{1a} + (3\gamma - 1)v_{2a}},$$

da qual decorre que

$$\frac{1}{v_{1a} + v_{2a}} = \frac{1}{(3 - \gamma)v_{1a} + (3\gamma - 1)v_{2a}},$$

contanto que $v_{1a} \neq v_{2a}$. Assim,

$$(1 - \gamma)(v_{1a} - v_{2a}) = 0,$$

cuja única solução é $\gamma = 1$.

Portanto, a reflexão especular ocorre apenas quando, no sistema original, as massas das duas partículas forem iguais.

Reflexão Especular no Espaço de Configuração $\hat{\mathbf{C}}^2$

A transformação canônica dada pela Eq. (D.1) permite-nos transformar o espaço de configuração \mathbf{C}^2 no espaço de configuração $\hat{\mathbf{C}}^2$, conforme a Fig. D.2(a), e a Eq. (D.2) na equação matricial

$$\mathbf{w}_d = R_f(\theta)\mathbf{w}_a \Leftrightarrow \begin{bmatrix} w_{1d} \\ w_{2d} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & \text{sen } \theta \\ \text{sen } \theta & -\cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_{1a} \\ w_{2a} \end{bmatrix}. \quad (\text{D.3})$$

Claramente, a reflexão especular nos catetos é preservada, valendo o mesmo argumento exposto acima no caso do espaço de configuração \mathbf{C}^2 .

Usamos o mesmo procedimento acima para mostrar a propriedade da reflexão especular. Rotacionando por um ângulo $\frac{\theta}{2}$ no sentido horário, obtemos a representação ilustrada na Fig. D.2(b) e, por conseguinte, também os estados \mathbf{w}_a e \mathbf{w}_d , em que

$$\mathbf{w}' = R_t(\zeta)\mathbf{w} \Leftrightarrow \begin{bmatrix} w'_1 \\ w'_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \zeta & -\text{sen } \zeta \\ \text{sen } \zeta & \cos \zeta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \end{bmatrix}.$$

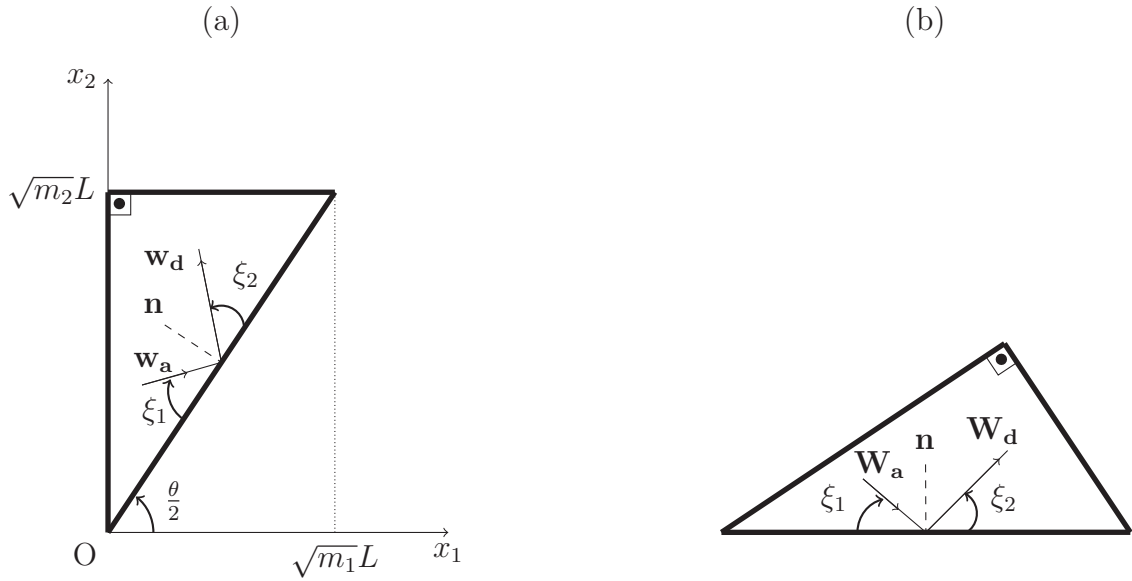


Figura D.2: (a) Espaço de configuração $\hat{\mathbf{C}}^2$: uma partícula com estado $\mathbf{w}_a = (w_{1a}, w_{2a})$ incide relativamente à hipotenusa em um ângulo ξ_1 e é refletida com estado $\mathbf{w}_d = (w_{1d}, w_{2d})$ em um ângulo ξ_2 relativamente à hipotenusa. (b) Região triangular do espaço de configuração $\hat{\mathbf{C}}^2$ rotacionado de $\frac{\theta}{2}$ no sentido horário, em que \mathbf{W}_a e \mathbf{W}_d são os estados correspondentes rotacionados, com \mathbf{n} indicando a direção perpendicular à hipotenusa.

Para a rotação horária de $\frac{\theta}{2}$, obtemos

$$\mathbf{W}_a = R_t \left(-\frac{\theta}{2} \right) \mathbf{w}_a \Rightarrow \begin{bmatrix} W_{1a} \\ W_{2a} \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} w_{1a} \cos \frac{\theta}{2} + w_{2a} \sin \frac{\theta}{2} \\ -w_{1a} \sin \frac{\theta}{2} + w_{2a} \cos \frac{\theta}{2} \end{bmatrix},$$

e usando a Eq. (D.3),

$$\mathbf{W}_d = R_t \left(-\frac{\theta}{2} \right) \mathbf{w}_d \Rightarrow \begin{bmatrix} W_{1d} \\ W_{2d} \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} w_{1a} \cos \frac{\theta}{2} + w_{2a} \sin \frac{\theta}{2} \\ w_{1a} \sin \frac{\theta}{2} - w_{2a} \cos \frac{\theta}{2} \end{bmatrix}.$$

Consequentemente, sendo $\text{tg } \xi_1 = \frac{W_{2a}}{W_{1a}}$ e $\text{tg } \xi_2 = \frac{W_{2d}}{W_{1d}}$,

$$\text{tg } \xi_1 = \frac{-w_{1a} \sin \frac{\theta}{2} + w_{2a} \cos \frac{\theta}{2}}{w_{1a} \cos \frac{\theta}{2} + w_{2a} \sin \frac{\theta}{2}}, \quad \text{tg } \xi_2 = \frac{w_{1a} \sin \frac{\theta}{2} - w_{2a} \cos \frac{\theta}{2}}{w_{1a} \cos \frac{\theta}{2} + w_{2a} \sin \frac{\theta}{2}},$$

ou seja

$$\text{tg } \xi_1 = -\text{tg } \xi_2.$$

Portanto, como os ângulos ξ_1 e ξ_2 são preservados nas Figs. D.2(a)-(b), a reflexão especular na hipotenusa do triângulo retângulo é válida para qualquer ângulo θ .

Ilustração da Vantagem da Notação Complexa sobre a Matricial

Ilustremos isso com uma sequência particular de colisões: sendo $v_1^{(0)}$ e $v_2^{(0)}$ as velocidades iniciais das partículas, em que $0 < v_2^{(0)} < v_1^{(0)}$, considere a sequência de colisões:

1. colisão p-p, gerando velocidades $v_1^{(1)} < 0$ e $v_2^{(1)} > 0$: $(v_1^{(1)}, v_2^{(1)}) = \mathbf{M}(\gamma)(v_1^{(0)}, v_2^{(0)})$;
2. colisão p-w, em que a partícula **2** é refletida na parede, gerando velocidades $v_1^{(2)} = v_1^{(1)} < 0$ e $v_2^{(2)} = -v_2^{(1)} < 0$: $(v_1^{(2)}, v_2^{(2)}) = \mathbf{R}(v_1^{(1)}, v_2^{(1)})$, em que $\mathbf{R}(v_1, v_2) = (v_1, -v_2)$, ou seja,

$$(v_1^{(2)}, v_2^{(2)}) = \mathbf{RM}(\gamma)(v_1^{(0)}, v_2^{(0)});$$

3. colisão p-p, gerando velocidades $v_1^{(3)} < 0$ e $v_2^{(3)} < 0$: $(v_1^{(3)}, v_2^{(3)}) = \mathbf{M}(\gamma)(v_1^{(2)}, v_2^{(2)})$, ou seja,

$$(v_1^{(3)}, v_2^{(3)}) = \mathbf{M}(\gamma)\mathbf{RM}(\gamma)(v_1^{(0)}, v_2^{(0)});$$

4. colisão p-w, em que a partícula **1** é refletida na parede, gerando velocidades $v_1^{(4)} = -v_1^{(3)} > 0$ e $v_2^{(4)} = v_2^{(3)} < 0$: $(v_1^{(4)}, v_2^{(4)}) = -\mathbf{R}(v_1^{(3)}, v_2^{(3)})$, ou seja,

$$(v_1^{(4)}, v_2^{(4)}) = -\mathbf{RM}(\gamma)\mathbf{RM}(\gamma)(v_1^{(0)}, v_2^{(0)});$$

5. colisão p-p, gerando velocidades $v_1^{(5)}$ e $v_2^{(5)}$: $(v_1^{(5)}, v_2^{(5)}) = \mathbf{M}(\gamma)(v_1^{(4)}, v_2^{(4)})$, ou seja,

$$(v_1^{(5)}, v_2^{(5)}) = -\mathbf{M}(\gamma)\mathbf{RM}(\gamma)\mathbf{RM}(\gamma)(v_1^{(0)}, v_2^{(0)}),$$

em que $\mathbf{RM}(\gamma) \neq \mathbf{M}(\gamma)\mathbf{R}$.

Realizando as multiplicações matriciais desta sequência, obtemos explicitamente o estado $(v_1^{(5)}, v_2^{(5)})$,

$$\begin{bmatrix} v_1^{(5)} \\ v_2^{(5)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\gamma^3 - 15\gamma^2 + 15\gamma - 1}{(1+\gamma)^3} & -\frac{6\gamma^3 - 20\gamma^2 + 6\gamma}{(1+\gamma)^3} \\ -\frac{6\gamma^2 - 20\gamma + 6}{(1+\gamma)^3} & -\frac{\gamma^3 - 15\gamma^2 + 15\gamma - 1}{(1+\gamma)^3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1^{(0)} \\ v_2^{(0)} \end{bmatrix}. \quad (\text{E.1})$$

Observe que as três colisões p-p geram um estado com uma dependência polinomial de grau três em γ ; assim, à medida que há mais colisões p-p, o grau desse polinômio também aumentará. Isso impõe uma dificuldade para se gerar analiticamente os estados possíveis para um dado γ . Por outro lado, tanto esta sequência de colisões, quanto o estado final são facilmente obtidos via notação complexa: sendo o estado inicial normalizado $z_0 = w_1^{(0)} + \imath w_2^{(0)}$, temos:

1. colisão p-p: $z_1 = e^{i\theta} \bar{z}_0$;
2. colisão p-w, em que a partícula **2** é refletida na parede: $z_2 = \bar{z}_1 = e^{-i\theta} z_0$;
3. colisão p-p: $z_3 = e^{i\theta} \bar{z}_2 = e^{i2\theta} \bar{z}_0$;
4. colisão p-w, em que a partícula **1** é refletida na parede: $z_4 = -\bar{z}_3 = -e^{-i2\theta} z_0$;
5. colisão p-p: $z_5 = e^{i\theta} \bar{z}_4 = -e^{i3\theta} \bar{z}_0$.

Explicitamente, o estado $z_5 = w_1^{(5)} + \imath w_2^{(5)}$ é

$$z_5 = (-w_1^{(0)} \cos 3\theta - w_2^{(0)} \sin 3\theta) + \imath (-w_1^{(0)} \sin 3\theta + w_2^{(0)} \cos 3\theta). \quad (\text{E.2})$$

Caso se queira obter valores numéricos de $(v_1^{(5)}, v_2^{(5)})$ a partir da Eq. (E.2), basta usar a definição $v_i = \sqrt{2m_i^{-1}} w_i$. Além disso, com esta definição juntamente com a Fórmula de De Moivre¹, podemos obter a Eq. (E.1) analiticamente.

Em vista disso, justificamos a preferência da utilização da notação complexa para os estados gerados pelo sistema.

¹A Fórmula de De Moivre estabelece que, dado um número complexo $z = |z|(\cos \theta + \imath \sin \theta)$, temos $z^n = |z|^n(\cos \theta + \imath \sin \theta)^n = |z|^n(\cos n\theta + \imath \sin n\theta)$ [107].

Hamiltoniano Clássico e Quântico de Duas Partículas Confinadas em uma Caixa 1D em Função das Coordenadas de Centro de Massa e Relativa

Analizamos neste apêndice o hamiltoniano clássico e quântico em termos das coordenadas de centro de massa e relativa para evidenciar a assimetria do espaço de configuração correspondente.

F.1 O Hamiltoniano Clássico

No Capítulo 3, vimos que o hamiltoniano clássico de duas partículas em uma caixa 1D é

$$\mathcal{H}(q_1, q_2, p_1, p_2) = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(q_1, q_2), \quad (\text{F.1})$$

com $\lambda \rightarrow \infty$ e $0 \leq q_1 \leq q_2 \leq L$ e $V(q_1, q_2) = \lambda[\delta(q_1) + \delta(q_1 - q_2) + \delta(q_2 - L)]$. Desejamos expressá-lo em coordenadas de centro de massa e relativa normalizadas X e x ,

$$X = x_1 \cos \frac{\theta}{2} + x_2 \sin \frac{\theta}{2}, \quad x = x_1 \sin \frac{\theta}{2} - x_2 \cos \frac{\theta}{2}, \quad (\text{F.2})$$

em que $\cos \frac{\theta}{2} = \sqrt{\frac{m_1}{m_1+m_2}}$ e $\sin \frac{\theta}{2} = \sqrt{\frac{m_2}{m_1+m_2}}$.

A representação matricial descrevendo a transformação das coordenadas (x_1, x_2) para

(x, X) é obtida das Eqs. (F.2),

$$\begin{bmatrix} x \\ X \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}\right) & -\sin\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}, \quad (\text{F.3})$$

em que

$$\sin\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}\right) = \cos\frac{\theta}{2} \quad \text{e} \quad \cos\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}\right) = \sin\frac{\theta}{2}.$$

A Eq. (F.3) é uma rotação anti-horária de $\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}\right)$ do espaço de configuração da Fig. 3.2(a), gerando o espaço de configuração da Fig. F.1 (note que a representação matricial de uma transformação das coordenadas (x_1, x_2) para (X, x) é uma reflexão por um ângulo $\frac{\theta}{2}$, a mesma regra de troca de momentos normalizados).

Para se obter o hamiltoniano clássico associado ao espaço de configuração da Fig. F.1, considere as coordenadas do centro de massa e relativa,

$$Q = \frac{m_1 q_1 + m_2 q_2}{m_1 + m_2}, \quad q = q_1 - q_2. \quad (\text{F.4})$$

Consequentemente,

$$q_1 = Q + \frac{m_2}{M}q, \quad q_2 = Q - \frac{m_1}{M}q. \quad (\text{F.5})$$

Substituindo as coordenadas q_i pelas coordenadas normalizadas $x_i = q_i \sqrt{m_i}$, obtemos

$$Q = \frac{X}{\sqrt{M}}, \quad (\text{F.6})$$

$$q = \frac{x}{\sqrt{\mu}}, \quad (\text{F.7})$$

em que $M = m_1 + m_2$ e $\mu = \frac{m_1 m_2}{M}$. Logo, a substituição das Eqs. (F.6) e (F.7) nas Eqs. (F.5) resulta em

$$q_1 = \frac{X}{\sqrt{M}} + \frac{\text{tg}\frac{\theta}{2}}{\sqrt{M}}x, \quad q_2 = \frac{X}{\sqrt{M}} - \frac{(\text{tg}\frac{\theta}{2})^{-1}}{\sqrt{M}}x. \quad (\text{F.8})$$

Desse modo, o potencial $V(q_1, q_2)$ nessas novas coordenadas fica

$$\tilde{V}(x, X) = \lambda \left[\sqrt{M} \delta \left(X + x \text{tg}\frac{\theta}{2} \right) + \sqrt{\mu} \delta(x) + \sqrt{M} \delta \left(X - x \left(\text{tg}\frac{\theta}{2} \right)^{-1} - \sqrt{M}L \right) \right]. \quad (\text{F.9})$$

A Eq. (F.9) mostra que o potencial $\tilde{V}(x, X)$ delimita a região 2D entre as retas

$$\mathbf{R}_1 : x = 0, \quad (\text{F.10})$$

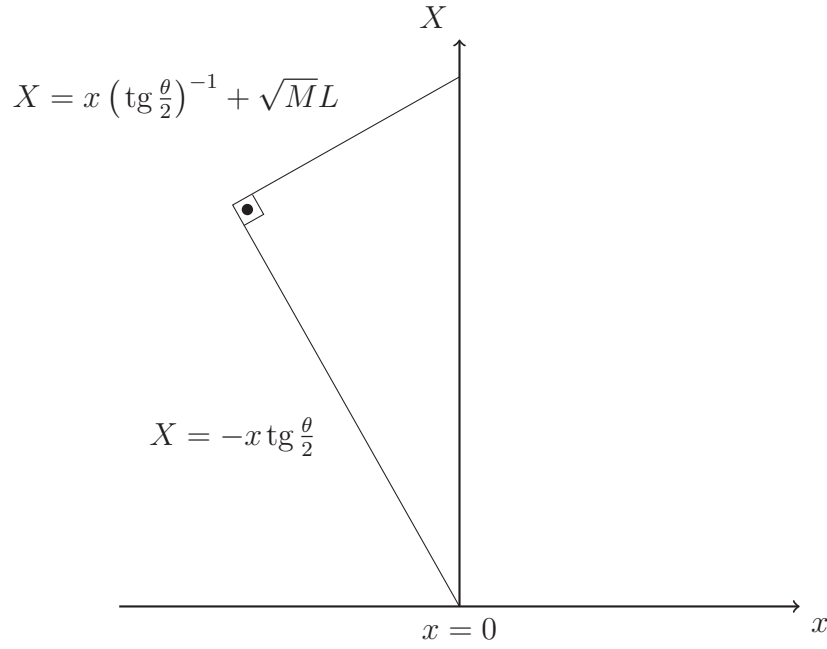


Figura F.1: Espaço de configuração com relação ao hamiltoniano clássico.

$$\mathbf{R}_2 : X = -x \operatorname{tg} \frac{\theta}{2}, \quad (\text{F.11})$$

$$\mathbf{R}_3 : X = x \left(\operatorname{tg} \frac{\theta}{2} \right)^{-1} + \sqrt{ML}, \quad (\text{F.12})$$

isto é, temos o espaço de configuração da Fig. F.1. Note que o produto dos coeficientes angulares das retas \mathbf{R}_2 e \mathbf{R}_3 é -1, ou seja, essas retas são perpendiculares entre si [196].

Expressando os momentos das partículas p_i em termos dos momentos de centro de massa p_{cm} e relativo p_r , temos

$$p_1 = \frac{m_1}{M} p_{\text{cm}} + p_r, \quad p_2 = \frac{m_2}{M} p_{\text{cm}} - p_r,$$

os quais são tais que

$$\frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} = \frac{p_{\text{cm}}^2}{2m_1} + \frac{p_r^2}{2m_2}.$$

Definindo $p_{\text{cm}} = \sqrt{2m} P_{\text{cm}}$ e $p_r = \sqrt{2m} P_r$, obtemos o hamiltoniano clássico em termos de momentos normalizados,

$$\tilde{\mathcal{H}}(x, X, P_{\text{cm}}, P_r) = P_{\text{cm}}^2 + P_r^2 + \tilde{V}(x, X). \quad (\text{F.13})$$

Como o hamiltoniano é clássico, as regiões delimitadas pelas retas \mathbf{R}_1 , \mathbf{R}_2 e \mathbf{R}_3 são impenetráveis e, sendo assim, temos que impor o limite $\lambda \rightarrow \infty$ no potencial.

F.2 O Hamiltoniano Quântico

A versão quântica do hamiltoniano da Eq. (F.1) é

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial q_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial q_2^2} + \mathcal{V}(q_1, q_2), \quad (\text{F.14})$$

em que o potencial $\mathcal{V}(q_1, q_2)$ possui, agora, mais dois termos,

$$\mathcal{V}(q_1, q_2) = \lambda[\delta(q_1) + \delta(q_1 - L) + \delta(q_1 - q_2) + \delta(q_2 - L) + \delta(q_2)],$$

pois as partículas podem tunelar entre si.

Nas coordenadas (x_1, x_2) , o espaço de configuração do sistema é um retângulo com uma diagonal, conforme a Fig. 4.1(b). A aplicação da Eq. (F.3) nessas coordenadas rotaciona o espaço de configuração por um ângulo $(\frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2})$ no sentido anti-horário, gerando o espaço de configuração da Fig. F.2. Verifiquemos que o potencial $\mathcal{V}(q_1, q_2)$ nas coordenadas (x, X) coincide com esse retângulo rotacionado.

Usando as Eqs. (F.5)-(F.8) em $\mathcal{V}(q_1, q_2)$, obtemos

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{V}}(x, X) = \lambda \left[\sqrt{M} \delta \left(X + x \operatorname{tg} \frac{\theta}{2} \right) + \sqrt{M} \delta \left(X + x \operatorname{tg} \frac{\theta}{2} - \sqrt{ML} \right) + \sqrt{\mu} \delta(x) + \right. \\ \left. + \sqrt{M} \delta \left(X - x \left(\operatorname{tg} \frac{\theta}{2} \right)^{-1} - \sqrt{ML} \right) + \sqrt{M} \delta \left(X - x \left(\operatorname{tg} \frac{\theta}{2} \right)^{-1} \right) \right]. \quad (\text{F.15}) \end{aligned}$$

A Eq. (F.15) mostra que o potencial delimita a região 2D nas retas \mathbf{R}_1 , \mathbf{R}_2 e \mathbf{R}_3 , além das retas,

$$\mathbf{R}_4 : X = x \left(\operatorname{tg} \frac{\theta}{2} \right)^{-1}, \quad (\text{F.16})$$

$$\mathbf{R}_5 : X = -x \operatorname{tg} \frac{\theta}{2} + \sqrt{ML}. \quad (\text{F.17})$$

As retas \mathbf{R}_4 e \mathbf{R}_5 têm o mesmo coeficiente angular das retas \mathbf{R}_3 e \mathbf{R}_2 , respectivamente, mostrando que elas são paralelas; logo, a região 2D é o retângulo da Fig. F.2.

Podemos determinar o ponto A = (x_A, X_A) de intersecção das retas \mathbf{R}_2 e \mathbf{R}_3 e o ponto B = (x_B, X_B) de intersecção das retas \mathbf{R}_4 e \mathbf{R}_5 , resolvendo-se o sistema de Eqs. (F.11) e (F.12) e o sistema de Eqs. (F.16) e (F.17), dando

$$A = \left(-\frac{\sqrt{ML}}{2} \operatorname{sen} \theta, \sqrt{ML} \operatorname{sen}^2 \frac{\theta}{2} \right), \quad (\text{F.18})$$

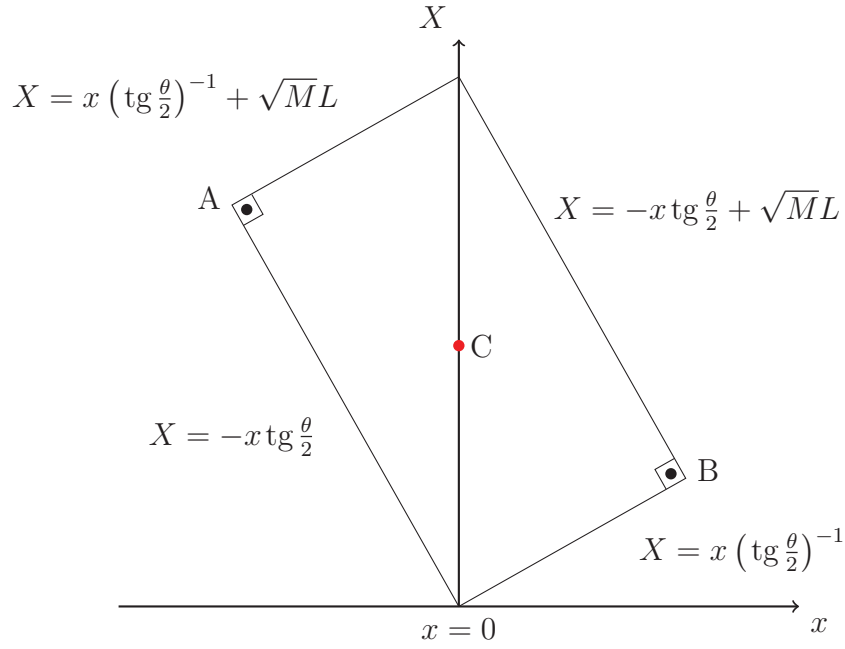


Figura F.2: Espaço de configuração com relação ao hamiltoniano quântico.

$$B = \left(\frac{\sqrt{ML}}{2} \sin \theta, \sqrt{ML} \cos^2 \frac{\theta}{2} \right). \quad (F.19)$$

Comparando as coordenadas desses pontos, vemos que as posições relativas são simétricas, $x_A = -x_B$, mas não as posições do centro de massa, $X_A \neq -X_B$. A simetria ocorre apenas para $\theta = \frac{\pi}{2}$ e, nesse caso, a região retangular torna-se uma região quadrada.

Assim, em geral, a função de onda do sistema $\tilde{\Psi}(x, X)$ não é simétrica em relação ao eixo X . No entanto, há uma simetria de reflexão invertida: em relação ao centro do retângulo da Fig. F.2, que é o ponto $C = \left(0, \frac{\sqrt{ML}}{2}\right)$ (em vermelho), a função de onda tem o mesmo valor nos pontos (x, X) diametralmente opostos.

Para o caso específico de duas partículas confinadas em 1D que podem tunelar entre si, é necessário redefinir as intensidades dos potenciais, de maneira que

$$\begin{aligned} \tilde{V}(x, X) = & \Lambda \left[\sqrt{M} \delta \left(X + x \operatorname{tg} \frac{\theta}{2} \right) + \sqrt{M} \delta \left(X + x \operatorname{tg} \frac{\theta}{2} - \sqrt{ML} \right) + \right. \\ & \left. + \sqrt{M} \delta \left(X - x \left(\operatorname{tg} \frac{\theta}{2} \right)^{-1} - \sqrt{ML} \right) + \sqrt{M} \delta \left(X - x \left(\operatorname{tg} \frac{\theta}{2} \right)^{-1} \right) \right] + \lambda \sqrt{\mu} \delta(x), \end{aligned}$$

em que λ é finito e $\Lambda \rightarrow \infty$.

O hamiltoniano \tilde{H} em termos das coordenadas (x, X) é calculado aplicando-se as definições estabelecidas pelas Eqs. (F.4)-(F.8) nos operadores diferenciais da Eq. (F.14).

Contudo, isso é complicado no caso geral, pois a função de onda $\Psi(q_1, q_2)$ não é separável nas coordenadas (x, X) , por conta da assimetria do espaço de configuração da Fig. F.2. Apenas para o caso particular do espaço de configuração ser um quadrado que a função de onda é separável nas coordenadas (x, X) , ou seja, $\Psi(q_1, q_2) = \varphi(x)\phi(X)$, facilitando a determinação do hamiltoniano \tilde{H} .

Demonstração de que a Função de Onda Base Preserva a Continuidade, a Descontinuidade da Derivada Primeira e Satisfaz a Equação de Schrödinger

Considere a função de onda $\Psi(x_1, x_2) = \phi(X)\varphi(x)$. A função $\phi(X)$ e suas derivadas são contínuas para qualquer real X e $\varphi(x)$ é contínua para qualquer real x , mas tendo derivada primeira descontínua em $x = 0$, conforme a Eq. (4.7). A função $\Psi(x_1, x_2)$ também deve ser contínua para qualquer x_1, x_2 reais e ter sua derivada primeira descontínua em $x_2 = \sqrt{\gamma}x_1$, além de ela satisfazer a equação de Schrödinger.

Continuidade: Decorre da conservação do momento linear que $\kappa'_1 + \sqrt{\gamma}\kappa'_2 = \kappa_1 + \sqrt{\gamma}\kappa_2$; assim, a Eq. (4.22) em $x_2 = \sqrt{\gamma}x_1$ (sem os termos em B) fica

$$\Psi(x_1, \sqrt{\gamma}x_1) = \begin{cases} (a^-(\kappa_1, \kappa_2) + a^-(\kappa'_1, \kappa'_2))Ae^{(\kappa_1 + \sqrt{\gamma}\kappa_2)x_1}, & x_1 \leq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}} \\ (a^+(\kappa'_2, \kappa'_1) + a^+(\kappa_2, \kappa_1))Ae^{i(\sqrt{\gamma}\kappa_2 + \kappa_1)x_1}, & x_1 \geq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}} \end{cases},$$

em que,

$$a^-(\kappa_1, \kappa_2) + a^-(\kappa'_1, \kappa'_2) = 2, \quad a^+(\kappa'_2, \kappa'_1) + a^+(\kappa_2, \kappa_1) = 2.$$

Isto mostra que a função de onda é contínua em $x_2 = \sqrt{\gamma}x_1$.

Obs.: Por uma questão de ênfase, $\Psi(x_1, \sqrt{\gamma}x_1) := \Psi(x_1, x_2)|_{x_2=\sqrt{\gamma}x_1}$.

Descontinuidade: Como o potencial de interação contém um delta de Dirac, a derivada primeira da função de onda deve ser descontínua em $x_2 = \sqrt{\gamma}x_1$. Para que essa descontinuidade esteja coerente com a Eq. (4.7), derivamos parcialmente $\Psi(x_1, x_2)$ em relação a x_1 e a x_2 , determinamos $\frac{\partial \Psi(x_1, \sqrt{\gamma}x_1)}{\partial x_i} = \frac{\partial \Psi(x_1, x_2)}{\partial x_i} \Big|_{x_2=\sqrt{\gamma}x_1}$ e multiplicamos os respectivos resultados por $\frac{1}{\sin \frac{\theta}{2}}$ e $\frac{1}{\cos \frac{\theta}{2}}$. O resultado é

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{\sin \frac{\theta}{2}} \frac{\partial \Psi(x_1, x_2)}{\partial x_1} - \frac{1}{\cos \frac{\theta}{2}} \frac{\partial \Psi(x_1, x_2)}{\partial x_2} \right) \Big|_{\sqrt{\gamma}x_1 - x_2 = 0^+} - \\ & - \left(\frac{1}{\sin \frac{\theta}{2}} \frac{\partial \Psi(x_1, x_2)}{\partial x_1} - \frac{1}{\cos \frac{\theta}{2}} \frac{\partial \Psi(x_1, x_2)}{\partial x_2} \right) \Big|_{\sqrt{\gamma}x_1 - x_2 = 0^-} = 4\tilde{\lambda}\Psi(x_1, \sqrt{\gamma}x_1), \end{aligned} \quad (\text{G.1})$$

após a substituição de κ'_1 e κ'_2 em termos de κ_1 e κ_2 , de $1 - \cos \theta = 2\sin^2 \frac{\theta}{2}$, $1 + \cos \theta = 2\cos^2 \frac{\theta}{2}$, $\sin \theta = 2\sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}$, $a^-(\kappa_1, \kappa_2) - a^-(\kappa'_1, \kappa'_2) = \frac{2i\tilde{\lambda}}{\kappa_1 \sin \frac{\theta}{2} - \kappa_2 \cos \frac{\theta}{2}}$ e $\Psi(x_1, \sqrt{\gamma}x_1) = 2Ae^{i(\kappa_1 + \sqrt{\gamma}\kappa_2)x_1}$. Para se ter certeza que a Eq. (G.1) está correta, devemos obter a partir dela a Eq. (4.7); de fato, sendo

$$\frac{1}{\sin \frac{\theta}{2}} \frac{\partial \Psi(x_1, x_2)}{\partial x_1} = \phi(X)D_x\varphi(x), \quad \frac{1}{\cos \frac{\theta}{2}} \frac{\partial \Psi(x_1, x_2)}{\partial x_2} = -\phi(X)D_x\varphi(x),$$

de modo que

$$\frac{1}{\sin \frac{\theta}{2}} \frac{\partial \Psi(x_1, x_2)}{\partial x_1} - \frac{1}{\cos \frac{\theta}{2}} \frac{\partial \Psi(x_1, x_2)}{\partial x_2} = 2\phi(X)D_x\varphi(x), \quad (\text{G.2})$$

obtemos facilmente a Eq. (4.7) pela substituição da Eq. (G.2) na Eq. (G.1).

Satisfaz a Equação de Schrödinger: Derivando $\Psi(x_1, x_2)$ parcialmente duas vezes em relação a x_i , obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Psi(x_1, x_2)}{\partial x_1^2} &= \begin{cases} -A[a^-(\kappa_1, \kappa_2)\kappa_1^2 e^{i(\kappa_1 x_1 + \kappa_2 x_2)} + a^-(\kappa'_1, \kappa'_2)\kappa_1'^2 e^{i(\kappa'_1 x_1 + \kappa'_2 x_2)}], & x_1 \leq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}} \\ -A[a^+(\kappa'_2, \kappa'_1)\kappa_1'^2 e^{i(\kappa'_2 x_2 + \kappa'_1 x_1)} + a^+(\kappa_2, \kappa_1)\kappa_1^2 e^{i(\kappa_2 x_2 + \kappa_1 x_1)}], & x_1 \geq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}} \end{cases}, \\ \frac{\partial^2 \Psi(x_1, x_2)}{\partial x_2^2} &= \begin{cases} -A[a^-(\kappa_1, \kappa_2)\kappa_2^2 e^{i(\kappa_1 x_1 + \kappa_2 x_2)} + a^-(\kappa'_1, \kappa'_2)\kappa_2'^2 e^{i(\kappa'_1 x_1 + \kappa'_2 x_2)}], & x_1 \leq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}} \\ -A[a^+(\kappa'_2, \kappa'_1)\kappa_2'^2 e^{i(\kappa'_2 x_2 + \kappa'_1 x_1)} + a^+(\kappa_2, \kappa_1)\kappa_2^2 e^{i(\kappa_2 x_2 + \kappa_1 x_1)}], & x_1 \geq \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}} \end{cases}, \end{aligned}$$

Considerando o resultado acima válida na região $x_1 < \frac{x_2}{\sqrt{\gamma}}$, temos

$$\begin{aligned} & -\frac{\partial^2 \Psi(x_1, x_2)}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2 \Psi(x_1, x_2)}{\partial x_2^2} = \\ & = A[(\kappa_1^2 + \kappa_2^2)a^-(\kappa_1, \kappa_2)e^{i(\kappa_1 x_1 + \kappa_2 x_2)} + (\kappa_1'^2 + \kappa_2'^2)a^-(\kappa'_1, \kappa'_2)e^{i(\kappa'_1 x_1 + \kappa'_2 x_2)}] = \end{aligned}$$

$$= \mathcal{E}A[a^-(\kappa_1, \kappa_2)e^{i(\kappa_1 x_1 + \kappa_2 x_2)} + a^-(\kappa'_1, \kappa'_2)e^{i(\kappa'_1 x_1 + \kappa'_2 x_2)}] = \mathcal{E}\Psi(x_1, x_2).$$

Obtemos o mesmo resultado na região $\sqrt{\gamma}x_1 > x_2$. Logo, a função de onda $\Psi(x_1, x_2)$ é solução da Eq. (4.2) para $x \neq 0$.

Assim, qualquer combinação de ondas planas da forma da Eq. (4.22) (ou a Eq. (4.27)) será contínua, sua derivada primeira exibirá a descontinuidade de um delta de Dirac e será solução da equação de Schrödinger.

Referências Bibliográficas

- [1] H. A. Bethe. Zur Theorie der Metalle. Eigenwerte und Eigenfunktionen der linearen Atomkette. *Zeitschrift für Physik* **71**, 205–226 (1931).
- [2] G. E. Brown e C.-H. Lee., editores. *Hans Bethe and his Physics* (World Scientific Publishing Company, 2006).
- [3] M. Karbach e G. Muller. Introduction to the Bethe Ansatz I (1998). URL <https://arxiv.org/abs/cond-mat/9809162>.
- [4] M. Gaudin. *La Fonction d'onde de Bethe* (Paris Masson, 1983).
- [5] M. Gaudin. *The Bethe Wavefunction* (Cambridge University Press, 2014). Tradução do francês por Jean-Sébastien Caux, Universiteit van Amsterdam.
- [6] L. D. FADDEEV. Algebraic Aspects of the Bethe Ansatz. *International Journal of Modern Physics A* **10**, 13, 1845–1878 (1995).
- [7] A. Doikou, S. Evangelisti, G. Feveratti e N. Karaiskoss. Introduction to the Quantum Integrability. *International Journal of Modern Physics A* **25**, 17, 3307–3351 (2010).
- [8] J.-S. Caux e J. Mossel. Remarks on the notion of quantum integrability. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* **2011**, 2, P02023 (2011).
- [9] D. Braak. Integrability of the Rabi Model. *Physical Review Letters* **107**, 10, 100401 (2011).
- [10] M. Takahashi. *Thermodynamics of One-dimensional Solvable Models* (Cambridge University Press, 1999).

- [11] M. A. Olshanetsky e A. M. Perelomov. Quantum Integrable related to Lie Algebras. *Physics Reports* **94**, 6, 313–404 (1983).
- [12] C. Gómez, M. Ruiz-Altaba e G. Sierra. *Quantum Groups in Two-dimensional Physics* (Cambridge University Press, 1996).
- [13] V. G. Drinfeld. Quantum Groups. *Journal of Soviet Mathematics* **41**, 2, 898–915 (1988). Translated from *Zapiski Nauchnykh Seminarov Leningradskogo Otdeleniya Matematicheskogo Instituta im. V. A. Steklova AN SSSR*, Vol. 155, pp. 18–49, 1986.
- [14] L. Hulthén. Über das Austauschproblem eines Kristalles. *Arkiv för matematik, astronomi och fysik A* **26**, 1 (1938). Tese de Doutorado.
- [15] E. H. Lieb e W. Liniger. Exact Analysis of an Interacting Bose Gas. I. The General Solution and the Ground State. *Physical Review* **130**, 1605–1616 (1963).
- [16] E. H. Lieb e W. Liniger. Exact Analysis of an Interacting Bose Gas. II. The Excitation Spectrum. *Physical Review* **130**, 1616–1624 (1963).
- [17] M. Girardeau. Relationship between Systems of Impenetrable Bosons and Fermions in One Dimension. *Journal of Mathematical Physics* **1**, 516 (1960).
- [18] P. Bocchieri e F. Miglietta. Systems of Impenetrable Bosons and Fermions with Spin 1/2 in One Dimension. *Il Nuovo Cimento B* **42**, 193–198 (1966).
- [19] T. Cheon e T. Shigehara. Fermion-Boson Duality of One-dimensional Quantum Particles with generalized Contact Interactions. *Physical Review Letters* **82**, 12, 2536–2539 (1999).
- [20] J. B. McGuire. Interacting Fermions in One Dimension I: Repulsive Potential. *Journal of Mathematical Physics* **6**, 3, 432–439 (1965).
- [21] J. B. McGuire. Interacting Fermions in One Dimension II: Attractive Potential. *Journal of Mathematical Physics* **7**, 1, 123–131 (1966).
- [22] C. N. Yang. Some Exact Results for the Many-Body Problem in One Dimension with Repulsive Delta-Function Interaction. *Physical Review Letters* **19**, 23, 1312–1315 (1967).
- [23] B. Sutherland. Further Results for the Many-Body Problem in One Dimension. *Physical Review Letters* **20**, 3, 98–100 (1968).

-
- [24] B. Sutherland. *Beautiful Models: 70 Years of Exactly Solved Quantum Many-Body Problems* (World Scientific Publishing Company, 2004).
- [25] R. J. Baxter. Partition function of the eight-vertex lattice model. *Annals of Physics* (1972).
- [26] R. J. Baxter. *Exactly solved models in statistical mechanics* (Dover, 2007).
- [27] L. Onsager. Crystal statistics I. A two dimensional model with an order-disorder transition. *Physical Review* **65**, 117–149 (1944).
- [28] C. N. Yang. S Matrix for the One-Dimensional N-Body Problem with Repulsive or Attractive Delta-Function Interaction. *Physical Review* **168**, 5, 1920–1923 (1968).
- [29] C. N. Yang e C. P. Yang. Thermodynamics of a One-Dimensional System of Bosons with Repulsive Delta-Function Interaction. *Journal of Mathematical Physics* **10**, 1115 (1969).
- [30] C. K. Lai e C. N. Yang. Ground-State Energy of a Mixture of Fermions and Bosons in One-Dimensional with a Repulsive Delta-Function Interaction. *Physical Review A* **3**, 1, 393–398 (1971).
- [31] C. K. Lai. Thermodynamics of a mixture of fermions and bosons in one dimension with a repulsive delta-function potencial. *Journal Mathematical Physics* **15**, 7, 954–956 (1974).
- [32] J. C. Zill, T. M. Wright, K. V. Kheruntsyan, T. Gasenzer e M. J. Davis. A coordinate Bethe ansatz approach to the calculation of equilibrium and nonequilibrium correlations of the one-dimensional Bose gas. *New Journal of Physics* **18**, 045010 (2016).
- [33] M. Gaudin. Boundary Energy of a Bose Gas in One Dimension. *Physical Review A* **4**, 1, 386–394 (1971).
- [34] E. Gutkin e B. Sutherland. Completely integrable systems and groups generated by reflections. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* **76**, 12, 6057–6059 (1979).
- [35] B. Sutherland. Nondiffractive scattering: Scattering from kaleidoscopes. *Journal Mathematical Physics* **21**, 7, 1770–1775 (1979).
- [36] M. A. Olshanetsky e A. M. Perelomov. Classical Integrable Finite-dimensional systems related to Lie Algebras. *Physics Reports* **71**, 5, 313–400 (1981).

- [37] S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Hoegh-Krohn e H. Holden. *Solvable Models in Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, 1987).
- [38] M. Carreau. Four-parameter point-interaction in 1D quantum systems. *Journal of Physics A: Mathematical and General* **26**, 427–432 (1993).
- [39] F. A. Coutinho, Y. Nogami e J. F. Perez. Generalized point interactions in one-dimensional quantum mechanics. *Journal of Physics A: Mathematical and General* **30**, 3937–3945 (1997).
- [40] E. L. Martin Hallnäs e C. Paufler. Exact solution of two complementary one-dimensional quantum many-body systems on the half line. *Journal of Mathematical Physics* **46**, 052101 (2005).
- [41] Y.-Q. Li. Delta-Function bosons in a one-dimensional potential well. *Physical Review A* **52**, 1, 65–69 (1995).
- [42] Y.-Q. Li. Delta-Function spin-1/2 fermions in a one-dimensional potential well. *Physical Review A* **53**, 6, 3743–3748 (1996).
- [43] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett e R. G. Hulet. Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions. *Physical Review Letters* **75**, 1687 (1995).
- [44] M. T. Batchelor, X. W. Guan, N. Oelkers e C. Lee. The 1D Interacting Bose gas in a hard wall box. *Journal of Physics A: Mathematical and General* **38**, 7787–7806 (2005).
- [45] M. A. Cazalilla, R. Citro, T. Giamarchi, E. Orignac e M. Rigol. One Dimensional Bosons: From Condensed Matter Systems to Ultracold Gases. *Review Modern of Physics* **83**, 1405 (2011).
- [46] X.-W. Guan, M. T. Batchelor e C. Lee. Fermi Gases in One-dimension: From Bethe Ansatz to Experiments. *Review Modern of Physics* **85**, 1633 (2013).
- [47] A. H. van Amerongen et al. Yang-Yang Thermodynamics on an Atom Chip. *Physical Review Letters* **100**, 090402 (2008).
- [48] B. Paredes. Tonks-Girardeau gas of ultracold atoms in an optical lattice. *Nature* **429**, 277–281 (2004).
- [49] L. R. Walker. Antiferromagnetic linear chain. *Physical Review* **116**, 1089 (1959).

- [50] J. des Cloizeaux e M. Gaudin. Anisotropic linear magnetic chain. *Journal Mathematical Physics* **7**, 1384 (1966).
- [51] C. N. Yang e C. P. Yang. One-Dimensional Chain of Anisotropic Spin-Spin Interactions. I. Proof of Bethe's Hypothesis for Ground State in a Finite System. *Physical Review* **150**, 321 (1966).
- [52] J. Hubbard. Electron Correlations in Narrow Energy Bands. *Proceedings of the Royal Society of London* **276**, 238–257 (1963).
- [53] E. H. Lieb e F. Y. Wu. Absence of Mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension. *Physics Review Letters* **20**, 1445–1448 (1968).
- [54] M. Ogata e H. Shiba. Bethe-ansatz wave function, momentum distribution, and spin correlation in the one-dimensional strongly correlated Hubbard model. *Physical Review B* **41**, 4, 2326–2338 (1990).
- [55] E. H. Lieb e F. Y. Wu. The one-dimensional Hubbard model: a reminiscence. *Physics A: Statistical Mechanics and its Applications* **321**, 1–27 (2003).
- [56] J. Bardeen, L. N. Cooper e J. R. Schrieffer. Microscopic Theory of Superconductivity. *Physical Review* **106**, 162–164 (1957).
- [57] H.-Q. Zhou, J. Links, R. H. McKenzie e M. D. Gould. Superconducting correlations in metallic nanoparticles: Exact solution of the BCS model by the algebraic Bethe ansatz. *Physical Review B* **65**, 060502(R) (2002).
- [58] M. Olshanii e S. G. Jackson. An exactly solvable quantum four-body problem associated with the symmetries of an octacube. *New Journal of Physics* **17**, 105005 (2015).
- [59] A. S. Dehkharghani, A. G. Volosniev e N. T. Zinner. Impenetrable mass-imbalanced particles in one-dimensional harmonic traps. *Journal Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **49**, 085301 (2016).
- [60] N. L. Harshman, M. Olshanii, A. D. Dehkharghani, A. G. Volosniev, S. G. Jackson e N. T. Zinner. Integrable Families of Hard-Core Particles with Unequal Masses in a One-Dimensional Harmonic Trap. *Physical Review X* **7**, 041001 (2017).
- [61] Z. Bajnok, L. Palla e G. Takács. (Semi)classical analysis of sine-Gordon theory on a strip. *Nuclear Physics B* **702**, 3, 448–480 (2004).

- [62] I. Kostov. Semi-classical Scalar Products in the Generalised $SU(2)$ Model. Em V. Dobrev, editor, *Lie Theory and Its Applications in Physics*, volume 111, páginas 87–103 (Springer Verlag, 2014).
- [63] F. Franchini. Notes on Bethe Ansatz Techniques (2011). URL <https://arxiv.org/pdf/1309.4003.pdf>.
- [64] M. Borsi, B. Pozsgay e L. Pristiyák. Current Operators in Bethe Ansatz and Generalized Hydrodynamics: An Exact Quantum-Classical Correspondence. *Physical Review X* **10**, 011054 (2020).
- [65] R. Artuso, G. Casati e I. Guarneri. Numerical study on ergodic properties of triangular billiards. *Physical Review E* **55**, 6, 6384–6390 (1997).
- [66] A. L. de Azevedo. *O Problema de Quebra de Ergodicidade em um Sistema de 2 Partículas Confinadas e Interagentes*. Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Paraná (2015).
- [67] Y. G. Sinai. *Introduction to Ergodic Theory* (Princeton University Press, 1976). Tradução de V. Scheffer.
- [68] P. J. Richens e M. V. Berry. Pseudointegrable systems in classical and quantum mechanics. *Physica D* **2**, 3, 495–512 (1981).
- [69] Y. G. Sinai. On the foundations of the ergodic hypothesis for a dynamical system of statistical mechanics. *Soviet Mathematics Doklady* **4**, 1818–1822 (1963).
- [70] Y. G. Sinai. Dynamical systems with elastic reflections. *Russian Mathematical Surveys* **4**, 137–191 (1970).
- [71] E. Ott. *Chaos in Dynamical Systems* (Cambridge University Press, 1993).
- [72] L. Bunimovich. On the ergodic properties of nowhere dispersing billiards. *Communications in Mathematical Physics* **65**, 295–312 (1979).
- [73] A. Kaplan, M. Andersen, N. Friedman e N. Davidson. *Chaotic Dynamics and Transport in Classical and Quantum Systems*, volume 182 de *NATO Science Series*, capítulo Atomic-Optics Billiards, páginas 239–267 (Springer-Verlag, 2005).
- [74] G. Casati, C. Mejía-Monasterio e T. Prosen. Magnetically induced thermal rectification. *Physical Review Letters* **98**, 104302 (2007).

- [75] R. P. Taylor, R. Newbury, A. S. Sachrajda, Y. Feng, P. T. Coleridge, C. Dettmann, N. Zhu, H. G. A. Delage, P. J. Kelly e Z. Wasilewski. Self-Similar magnetoresistance of a semiconductor Sinai billiard. *Physical Review Letters* **78**, 10, 1952–1955 (1997).
- [76] J. Hadamard. Les surfaces à courbures opposées et leurs lignes géodésiques. *Journal de Mathématiques Pures et Appliquées* **4**, 27–73 (1898).
- [77] E. Artin. Ein mechanisches System mit quasi-ergodischen Bahnen. *Abhandlungen aus dem Mathematischen Seminar der Universität Hamburg* **3**, 170–175 (1924). Tradução.: Um sistema mecânico com órbitas quase ergódicas.
- [78] S. Tabachnikov. On the dual billiard problem. *Advances in Mathematics* **115**, 221–249 (1995).
- [79] S. Redner. A billiard-theoretic approach to elementary one-dimensional elastic collisions. *American Journal of Physics* **72**, 12, 1492–1498 (2004).
- [80] F. Lackner, I. Brezinová e J. Burgdörfer. Semiclassical wave function for open quantum billiards. *Physical Review E* **88**, 022916 (2013).
- [81] L. Meza-Montes e S. E. Ulloa. Dynamics of two interacting particles in classical billiards. *Physical Review E* **55**, 6, R6319–R6322 (1997).
- [82] E. P. S. Xavier, M. C. Santos, L. G. G. V. D. da Silva, M. G. E. da Luz e M. W. Beims. Quantum chaos for two interacting particles confined to a circular billiard. *Physica A* **342**, 377 (2004).
- [83] S. Lansel, M. A. Porter e L. A. Bunimovich. One-particle and few-particle billiards. *Chaos* **16**, 013129 (2006).
- [84] S. Rancovic e M. A. Porter. Two-particle circular billiards versus randomly perturbed one-particle circular billiards. *Chaos* **23**, 013123 (2013).
- [85] P. Hiemer e A. Snurnikov. Polygonal Billiards with Small Obstacles. *Journal of Statistical Physics* **90**, 453–465 (1998).
- [86] J. Wiersig. Spectral properties of quantized barrier billiards. *Physical Review E* **65**, 046217 (2002).
- [87] A. N. C. Adamson e A. H. Osbaldestin. Renormalisation of correlations in a barrier billiard: Quadratic irrational trajectories. *Physica D* **270**, 30–45 (2014).

- [88] A. Kohler, G. H. M. Killesreiter e R. Blümel. Ray splitting in a class of chaotic triangular step billiards. *Physical Review E* **56**, 2691–2701 (1997).
- [89] G. D. Magno, J. L. Dias, P. Duarte, J. P. Gaivão e D. Pinheiro. SRB Measures for Polygonal Billiards with Contracting Reflection Laws. *Communications on Mathematical Physics* **329**, 687–723 (2014).
- [90] M. V. Deryabin e L. D. Pustyl’nikov. Generalized relativistic billiards. *Regular and Chaotic Dynamics* **8**, 3, 283–296 (2003).
- [91] M. V. Deryabin e L. D. Pustyl’nikov. On Generalized Relativistic Billiards in External Force Fields. *Letters in Mathematical Physics* **63**, 3, 195–207 (2003).
- [92] E. Sadurní, T. H. Seligman e F. Mortessagne. Playing relativistic billiards beyond graphene. *New Journal of Physics* **12**, 053014 (2010).
- [93] S. R. Jain e S. V. Lawande. Almost Integrable Billiards. *Proceedings of the Indian National Science Academy* **61**, 5A, 275–336 (1995).
- [94] N. Lemos. *Mecânica Analítica* (Editora Livraria da Física, 2004), 1ª edição.
- [95] S. Weigert. The problem of quantum integrability. *Physica D* **56**, 107–119 (1992).
- [96] J. R. Munkres. *Topology* (Prentice Hall, 2000), 2nd edição.
- [97] M. P. do Carmo. *Geometria Diferencial de Curvas e Superfícies*. Textos Universitários (Sociedade Brasileira de Matemática, 2006), 2ª edição.
- [98] F. Valdez. Infinite genus surfaces and irrational polygonal billiards. *Geometriae Dedicata* **143**, 143–154 (2009).
- [99] A. N. Zemlyakov e A. B. Katok. Topological transitivity of billiards in polygons. *Mathematical notes of the Academy of Sciences of the USSR* **18**, 2, 760–764 (1975).
- [100] G. M. Zaslavsky. Low-rank perturbations and the spectral statistics of pseudo-integrable billiards. *Physics Reports* **371**, 461 (2002).
- [101] S. Tabachnikov. *Geometry and Billiards*, volume 30 de *Student Mathematical Library* (American Mathematical Society, 2005).
- [102] J. Smillie. Introduction to Rational Billiard (2007). URL <http://pi.math.cornell.edu/~vogtmann/MSRI/>.

- [103] K. Calta e J. Smillie. Algebraically Periodic Translation Surfaces. *Journal of Modern Dynamics* **2**, 2, 209–248 (2008).
- [104] W. S. Massey. *A Basic Course in Algebraic Topology* (Springer-Verlag, 1997).
- [105] A. Zorich. Flat Surfaces. Em P. Cartier, B. Julia, O. Moussa e P. Vanhove, editores, *Frontiers in Number Theory, Physics, and Geometry*, volume I, páginas 439–586 (Springer Verlag, 2006).
- [106] H. Masur e S. Tabachnikov. Rational Billiards and Flat Structures. Em B. Hasselblatt e A. Katok, editores, *Handbook of Dynamical Systems*, volume 1A, capítulo 13, páginas 1015–1089 (Elsevier Science, 2002), 1st edição.
- [107] J. W. Brown e C. V. Ruel. *Complex Variables and Applications* (McGraw-Hill Education, 2003), 7th edição.
- [108] A. A. Hauser. *Variáveis Complexas Com Aplicações à Física* (LTC, 1972).
- [109] G. A. Ford, A. Hassel e L. Hillairet. Wave propagation on Euclidean surfaces with conical singularities. I: Geometric diffraction. *Journal of Spectral Theory* **8**, 2, 605–667 (2018).
- [110] V. I. Arnold. *Mathematical Methods of Classical Mechanics* (Springer, 1978).
- [111] G. M. Zaslavsky. Nonintegrability and Fractional Kinetics Along Filamented Surfaces. *IUTAM Symposium on Hamiltonian Dynamics, Vortex Structures, Turbulence* **6**, 55–64 (2008).
- [112] G. M. Zaslavsky e M. Edelman. Weak mixing and anomalous kinetics along filamented surfaces. *Chaos* **11**, 2, 295–305 (2001).
- [113] M. P. Pato. Caos Quântico e Hamiltonianas Aleatórias. 100 Anos de Física Quântica páginas 187–204 (2002). Organizadores: M S Hussein and S R A Salinas.
- [114] O. Bohigas, M. J. Giannoni e C. Schmit. Characterization of chaotic quantum spectra and universality of level fluctuation laws. *Physical Review Letters* **52**, 1–4 (1984).
- [115] G. Casati e B. V. Chirikov. Energy-Level Statistics of Integrable Quantum Systems. *Physical Review Letters* **54**, 13, 1350–1353 (1985).
- [116] T. H. Seligman e J. J. M. Verbaarschot. Energy-Level of Integrable Quantum Systems. *Physical Review Letters* **56**, 25, 2767 (1986).

- [117] Z. Cheng e J. L. Lebowitz. Statistics of energy levels in integrable quantum systems. *Physical Review A* **44**, 6, R3399–R3402 (1991).
- [118] H.-J. Stöckmann. *Quantum Chaos: An Introduction* (Cambridge University Press, 1999).
- [119] P. Seba. Wave chaos in singular quantum billiard. *Physical Review Letters* **64**, 6, 1855–1858 (1990).
- [120] P. Šeba e K. Zyczkowski. Wave chaos in quantized classically nonchaotic systems. *Physical Review A* **44**, 6, 3457–3465 (1991).
- [121] T. Shigehara. Conditions for the appearance of wave chaos in quantum singular systems with a pointlike scatterer. *Physical Review E* **50**, 6, 4357–4370 (1994).
- [122] Y. Ashkenazy, L. P. Horwitz, J. Levitan, M. Lewkowitz e Y. Rothschild. Chaoticlike Behavior in a Quantum System without Classical Counterpart. *Physical Review Letters* **75**, 6, 1070–1073 (1995).
- [123] T. Gorin. Generic Spectral Properties of Right Triangle Billiards. *Journal of Physics A: Mathematical and General* **34**, 8281–8295 (2001).
- [124] B. I. Shklovskii, B. Shapiro, B. R. Sears, P. Lambrianides e H. B. Shore. Statistics of spectra of disordered systems near the metal-insulator transition. *Physical Review B* **47**, 11487 (1993).
- [125] D. Braun, G. Montambaux e M. Pascaud. Boundary Conditions at the Mobility Edge. *Physical Review Letters* **81**, 1062 (1998).
- [126] J. Marklof e Z. Rudnick. Almost all eigenfunctions of a rational polygon are uniformly distributed. *Journal of Spectral Theory* **2**, 1, 107–113 (2011).
- [127] A. Fazzio e K. Watari. *Introdução à Teoria de Grupos aplicada em moléculas e sólidos* (Editora UFSM, 2009), 2ª edição.
- [128] H. H. Domingues e G. Iezzi. *Álgebra Moderna* (Atual Editora, 2000), 3ª edição.
- [129] S. Lang. *Algebra* (Springer-Verlag, 2002), 3ª edição.
- [130] W.-K. Li. Degeneracy in the particle-in-a-square problem. *American Journal of Physics* **50**, 666 (1982).
- [131] W.-K. Li. A Particle in an Isosceles Right Triangle. *Journal of Chemical Education* **61**, 1034 (1984).

- [132] W.-K. Li e A. S. M. Blinder. Particle in an equilateral triangle: Exact solution of a nonseparable problem. *Journal of Chemical Education* **64**, 2, 130–132 (1987).
- [133] W. Gaddah. A Lie Group approach to the Schrödinger equation for a particle in an equilateral triangular infinite well. *European Journal of Physics* **34**, 1175–1186 (2013).
- [134] H. C. Schachner e G. M. Obermair. Quantum billiards in the shape of right triangles. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* **95**, 1, 113–119 (1994).
- [135] M. V. Berry e M. Tabor. Level clustering in the regular spectrum. *Proceedings of the Royal Society of London* **356**, 375–394 (1977).
- [136] J. Hietarinta. Solvability in quantum mechanics and classically superfluous invariants. *Journal of Physics A: Mathematical and General* **22**, L143–L147 (1989).
- [137] J. B. Keller. Geometrical Theory of Diffraction. *Journal of the Optical Society of America* **52**, 2, 116–130 (1962).
- [138] J. B. McGuire. Study of Exactly Soluble One-Dimensional N-Body Problems. *Journal of Mathematical Physics* **5**, 5, 622–636 (1964).
- [139] A. Sommerfeld. Mathematische Theorie der Diffraction. *Mathematische Annalen* **47**, 317–374 (1896).
- [140] F. Oberhettinger. Diffraction of waves by a wedge. *Communications on Pure and Applied Mathematics* **7**, 3, 551–563 (1954).
- [141] T. J. I. Bromwich. Diffraction of Waves by a Wedge. *Proceedings of the London Mathematical Society* **s2 14**, 1, 450–463 (1915).
- [142] W. Pauli. On Asymptotic Series for Functions in the Theory of Diffraction of Light. *Physical Review* **54**, 924–931 (1938).
- [143] H. S. Carslaw. Diffraction of Waves by a Wedge of any Angle. *Proceedings of the London Mathematical Society* **s2 18**, 1, 291–306 (1920).
- [144] W. E. Williams. Diffraction of an E-polarized plane wave by an imperfectly conducting wedge. *Proceedings of the Royal Society A* **252**, 1270, 376–393 (1959).
- [145] B. V. Budaev e D. B. Bogy. Rigorous solutions of acoustic wave diffraction by penetrable wedges. *The Journal of the Acoustical Society of America* **105**, 1, 74–83 (1999).

- [146] M. A. Lyalinov. Diffraction by a highly contrast transparent wedge. *Journal of Physics A: Mathematical and General* **32**, 11, 2183 – 2206 (1999).
- [147] G. Vattay, A. Wirzba e P. E. Rosenqvist. Periodic Orbit Theory of Diffraction. *Physical Review Letters* **73**, 17, 2304–2307 (1994).
- [148] C. Rouvinez e U. Smilansky. A scattering approach to the quantization of Hamiltonians in two dimensions – application to the wedge billiard. *Journal of Physics A: Mathematical and General* **28**, 77–104 (1995).
- [149] H. Primack, H. Schanz, U. Smilansky e I. Ussishkin. Penumbra Diffraction in the Quantization of Dispersing Billiards. *Physical Review Letters* **76**, 10, 1615–1618 (1996).
- [150] N. D. Whelan. Semiclassical Quantization Using Diffractive Orbits. *Physical Review Letters* **76**, 15, 2605–2608 (1996).
- [151] M. Sieber. Geometrical theory of diffraction and spectral statistics. *Journal of Physics A: Mathematical and General* **32**, 7679–7689 (1999).
- [152] V. V. Kozlov e D. V. Treshchëv. *Billiards: A Genetic Introduction to the Dynamics of Systems with Impacts* (American Mathematical Society, 1991).
- [153] R. Goodman. Alice through Looking Glass after Looking Glass: The Mathematics of Mirrors and Kaleidoscopes. *The American Mathematical Monthly* **111**, 281–298 (2004).
- [154] J. B. McGuire e C. A. Hurst. The Scattering of Three Impenetrable Particles in One Dimension. *Journal of Mathematical Physics* **13**, 10, 1595–1607 (1972).
- [155] J. B. McGuire e C. A. Hurst. Three interacting particles in one dimension: An algebraic approach. *Journal of Mathematical Physics* **29**, 1, 155–168 (1987).
- [156] A. Lamacraft. Diffractive scattering of three particles in one dimension: A simple result for weak violations of the Yang-Baxter equation. *Physical Review A* **87**, 012707 (2013).
- [157] M. Gaudin. Bose Gas in One Dimension I. The Closure Property of the Scattering Wavefunctions. *Journal of Mathematical Physics* **12**, 8, 1674–1676 (1971).
- [158] M. Gaudin. Bose Gas in One Dimensional II. Orthogonality of the Scattering States. *Journal of Mathematical Physics* **12**, 8, 1677–1680 (1971).

- [159] W. E. Boyce e R. C. DiPrima. *Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno* (Editora LTC, 1999), 6ª edição.
- [160] H. S. M. Coxeter. *Regular Polytopes* (Dover, 1973), 3rd edição.
- [161] R. Kane. *Reflection Groups and Invariant* (Springer-Verlag, 2001).
- [162] A. V. Borovik e A. Borovik. *Mirrors and Reflection - The Geometry of Finite Reflection Groups* (Springer-Verlag, 2010).
- [163] D. W. Morris. What is a Coxeter Group? (2013). URL <http://people.uleth.ca/~dave.morris/talks/CoxeterGroups.pdf>.
- [164] M. W. Davis. *The Geometry and Topology of Coxeter Groups*. London Mathematical Society Monographs (Princeton University Press, 2007).
- [165] M. J. Wenninger. *Dual Models* (Cambridge University Press, 2008).
- [166] G. Manfredi, J.-L. Rouet e R. Dufour. On some analogies concerning the N-body problem, quantum billiards and the refraction of a light beam. *European Journal of Physics* **14**, 5, 206–210 (1993).
- [167] H. M. Nussenzveig. *Curso de Física Básica*, volume 1 (Editora Edgar Blücher Ltda., 2002), 4ª edição.
- [168] M. Hasegawa. Broken ergodic motion of two hard particles in a one-dimensional box. *Physics Letters A* **242**, 19–24 (1998).
- [169] S. Hassani. *Mathematical Physics: a modern introduction to its foundations* (Springer-Verlag, 1999).
- [170] J. R. Dorfman. *An Introduction to Chaos in Nonequilibrium Statistical Mechanics* (Cambridge University Press, 1999).
- [171] W. F. Wreszinski. *Mecânica Clássica Moderna* (EDUSP, 1997).
- [172] B. Hasselblatt e A. Katok. *A First Course in Dynamics: with a panorama of recent developments* (Cambridge University Press, 2003).
- [173] P. Walters. *An Introduction to Ergodic Theory* (Springer-Verlag, 1982).
- [174] L. Kuipers e H. Niederreiter. *Uniform Distribution of Sequences* (John Wiley & Sons, Inc., 1974).

-
- [175] J. Wang, G. Casati e T. Prosen. Nonergodicity and localization of invariant measure for two colliding masses. *Physical Review E* **89**, 0429181–0429184 (2014).
- [176] J. F. Cariñena, F. Falceto, J. Grabowski e M. F. Rañada. Geometry of Lie integrability by quadratures. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **48**, 21, 215206 (2015).
- [177] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu e F. Laloe. *Quantum Mechanics*, volume 2 (John Wiley & Sons, Inc., 1991), 1st edição.
- [178] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu e F. Laloe. *Quantum Mechanics*, volume 1 (John Wiley & Sons, Inc., 1991), 1st edição.
- [179] M. G. E. da Luz, A. S. Lupu-Sax e E. J. Heller. Quantum scattering from arbitrary boundaries. *Physical Review E* **56**, 3, 2496–2507 (1997).
- [180] F. M. Zanetti, E. Vicentini e M. G. E. da Luz. Eigenstates and scattering solutions for billiard problems: A boundary wall approach. *Annals of Physics* **323**, 7, 1644–1676 (2008).
- [181] F. M. Zanetti. *Método do Contorno de Paredes Aplicado a Bilhares Quânticos*. Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Paraná (2004).
- [182] M. V. Berry. Regular and irregular semiclassical wavefunctions. *Journal of Physics A: Mathematical and General* **10**, 12, 2083–2091 (1977).
- [183] M. van Vessen Jr., M. C. Santos, B. K. Cheng e M. G. E. da Luz. Origin of quantum chaos for two particles interacting by short-range potentials. *Physical Review E* **64**, 026201 (2001).
- [184] M. van Vessen Jr. *Bilhares Quânticos Formados por 2 Partículas Interagindo por Potenciais de Curto Alcance*. Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Paraná (2000).
- [185] K. Zyczkowski. Classical and Quantum Billiards: Integrable, Nonintegrable and Pseudo-Integrable. *Acta Physica Polonica B* **23**, 3, 245–270 (1992).
- [186] J. M. H. Olmsted. Rational Values of Trigonometric Functions. *American Mathematics Monthly*. 52 (9): 507–508. **52**, 9, 507–508 (1945).
- [187] J. B. McCartin. On Polygonal Domains with Trigonometric Eigenfunctions of the Laplacian under Dirichlet or Neumann Boundary Conditions. *Applied Mathematical Sciences* **2**, 58, 2891–2901 (2008).

-
- [188] F. Oberhettinger. On the Diffraction and Reflection of Waves and Pulses by Wedges and Corners. *Journal of Research of the National Bureau of Standards* **61**, 5, 343–365 (1958).
- [189] E. Bogomolny. Formation of superscar waves in plane polygonal billiards (2019). URL <https://arxiv.org/abs/1902.02334>.
- [190] C. Jung. An exactly soluble three-body problem in one dimension. *Canadian Journal of Physics* **58**, 6, 719–728 (1980).
- [191] J. P. de O. Santos. *Introdução à Teoria dos Números* (IMPA, 2006), 3ª edição.
- [192] E. L. Lima. *Curso de Análise*, volume 1 (IMPA, 2002), 10ª edição.
- [193] G. Iezzi. *Fundamentos de Matemática Elementar*, volume 1 (Atual Editora., 2004), 8ª edição.
- [194] N. Pavloff e C. Schmit. Diffractive Orbits in Quantum Billiards. *Physical Review Letters* **75**, 1, 61–64 (1995).
- [195] J. R. Weeks. *The Shape of Space* (Marcel Dekker Inc., 2002), 2nd edição.
- [196] G. Iezzi. *Fundamentos de Matemática Elementar*, volume 7 (Atual Editora., 2004), 4ª edição.